UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Gustavo Massao Yoshitome

Equações de Fokker-Planck, formas entrópicas, exponenciais e logaritmos generalizados

Maringá, 25 de março de 2021.

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Gustavo Massao Yoshitome

Equações de Fokker-Planck, formas entrópicas, exponenciais e logaritmos generalizados

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 do Santos Mendes

Maringá, 25 de março de 2021.

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

Yoshitome, Gustavo Massao
Y65e Equações de Fokker-Planck, formas entrópicas, exponenciais e logaritmos generalizados / Gustavo Massao Yoshitome. -- Maringá, PR, 2022.
66 f.: il., figs.

Orientador: Prof. Dr. Renio dos Santos Mendes.
Dissertação (Mestrado) - Universidade Estadual de Maringá, Centro de Ciências Exatas, Departamento de Física, Programa de Pós-Graduação em Física, 2022.

1. Mecânica estatística. 2. Equações de Fokker-Planck. 3. Álgebra - Logaritmos. I. Mendes, Renio dos Santos, orient. II. Universidade Estadual de Maringá. Centro de Ciências Exatas. Departamento de Física. Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

CDD 23.ed. 530.13

Márcia Regina Paiva de Brito - CRB-9/1267

GUSTAVO MASSAO YOSHITOME

Equações de Fokker-Planck, formas entrópicas e logaritmos e exponenciais generalizados

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

Aprovado em: Maringá, 28 de janeiro de 2022.

BANCA EXAMINADORA

____

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

____

Prof. Dr. Luciano Rodrigues da Silva
Universidade Federal do Rio Grande do Norte – UFRN

____

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

Resumo

Este trabalho possui como foco o estudo de três aspectos distintos e entrelaçados de mecânica estatística generalizada. São eles, formas entrópicas, equações de Fokker-Planck, exponenciais e logaritmos generalizados. Iniciamos o estudo apresentando conceitos fundamentais sobre a mecânica estatística usual, sendo o primeiro a entropia de Boltzmann-Gibbs e algumas das suas características, seguida pela equação de Fokker-Planck usual, fazendo um estudo sobre sua solução estacionária e relacionando com um teorema-H. Seguimos com um estudo sobre a mecânica estatística de Tsallis. Nesse contexto, consideramos uma forma entrópica que generaliza a de Boltzmann-Gibbs, a entropia de Tsallis. Também apresentamos a q-exponencial e o q-logaritmo que permitem a generalização das operações algébricas usuais. Ainda no contexto de Tsallis, mostramos que esse formalismo está conectado com uma equação de Fokker-Planck não linear. A partir dessas duas mecânicas estatísticas, exibimos um novo formalismo de equações de Fokker-Planck, tanto lineares quanto não lineares, analisando principalmente sua solução estacionária que nos permite definir uma generalização de exponenciais mais abrangentes. Nessa linha, vemos como podemos definir uma forma entrópica generalizada que possui a distribuição de máxima entropia relacionada à solução estacionária da equação de Fokker-Planck, permitindo um formalismo que conecta os três conceitos apresentados (equações de Fokker-Planck, formas entrópicas e exponenciais generalizadas). Ressalta-se também que esses conceitos encontram uma nítida conexão via um teorema-H. Introduzimos ainda uma álgebra generalizada a partir dessas exponenciais, de forma análoga ao visto na vertente de Tsallis. Essa álgebra é ilustrada em três cenários: estatística de Tsallis, estatística de Kaniadakis e exponencial alongada.

Palavras-chave: Formas entrópicas, equações de Fokker-Planck, Teorema-H, exponenciais generalizadas.

Abstract

This work has as main focus three distinct but intertwined aspects that compose features of generalized statistical mechanics, namely, entropic forms, Fokker-Planck equations, generalized exponentials, and logarithms. We start the study by presenting some fundamental concepts of usual statistical mechanics. Firstly, the Boltzmann-Gibbs entropic form and some of its characteristics, then we briefly discuss the usual Fokker-Planck equation, particularly, its stationary solutions, relating them via an H-theorem. We follow by studying the Tsallis generalization of statistical mechanics. In this context, we present an entropic form that inspire the definition of q-exponentials and q-logarithms. These functions allow for a generalization of the basic algebraic operations. Still in the context of Tsallis statistics, we show how this formalism is related to a nonlinear Fokker-Planck equation. After the exhibition of these distinct statistical mechanics, we investigate a new formalism of a generalization of Fokker-Planck equations, that include both linear and nonlinear forms, mainly focusing on its stationary solution, that allows us to define a new family of generalized exponentials. In this line of reasoning, we propose a new generalized entropic form that is related to the stationary solution of Fokker-Planck equations when the maximum entropy principle is used. These generalized concepts, will also be connected via an H-theorem. We introduce a new generalized algebra associated with the generalized exponentials, analogous to the one in the Tsallis context. This algebra is exemplified in three different scenarios: Tsallis statistics, Kaniadakis statistics, and stretched exponential.

Keywords: Entropic forms, Fokker-Planck equations, H-theorem, generalized exponentials.

Conteúdo

Introdução

Sistemas físicos que envolvem uma grande quantidade de variáveis, como os de muitas partículas, costumam apresentar algumas dificuldades devido a quantidade de interações que tornam as equações difíceis de serem estudadas. Nesse contexto, a termodinâmica se mostrou fundamental para estudar tais sistemas por meio de grandezas macroscópicas. Entretanto, o surgimento da mecânica estatística mostrou uma alternativa para estudar esses sistemas via suas interações. O sucesso de sua aplicação se deve, em grande parte, pela forma entrópica de Boltzmann-Gibbs. Um dos papeis fundamentais da entropia é sua interpretação de ordem associada à probabilidade dos microestados, que faz a conexão com a termodinâmica [1, 2]. Mais ainda, esse estudo probabilístico também está comumente presente em equações de difusão relacionadas à equação de Fokker-Planck. Nesse contexto, a mecânica estatística possui uma característica de irreversibilidade que é manifestada no teorema-H, significando que a segunda lei da termodinâmica é respeitada. Apesar de todo esse sucesso, a mecânica estatística usual se mostra insuficiente para explicar alguns sistemas, particularmente os que envolvem interações de longo alcance e efeitos de memória [3].

Dificuldades em aplicar a mecânica estatística têm sido identificada e abrem portas para possíveis teorias que pudessem explicar essas eventuais falhas. Nesse contexto, surgiram teorias que tentavam englobar a mecânica estatística pautada na entropia de Boltzmann-Gibbs e ao mesmo tempo explicava esses buracos deixadas por ela. Uma delas é a de Tsallis. Em 1988, Constantino Tsallis propôs uma generalização da mecânica estatística [4]. Ela é baseada em uma entropia monoparamétrica que é capaz de retornar ao caso usual. Uma das principais particularidades dessa entropia é sua não aditividade, em contraste com a entropia de Boltzmann-Gibbs. Nesse contexto, surgiram duas funções conhecidas como q-exponencial e q-logaritmo, que são generalizações da exponencial e logaritmo, centrais para construção dessa mecânica estatística. Essas funções tornam as notações mais simples e, principalmente, permitem interpretações mais claras dos resultados obtidos. Fora do campo das generalizações, essas funções também encontraram aplicações como boas aproximações em modelagem de dados [3, 5]. Outra função importante nesse contexto é a q-gaussiana que é uma generalização da gaussiana, e incorpora desvios desta. Ela também já foi aplicada em vastos estudos como, por exemplo, em mercados financeiros [6–10], estudo de moléculas de DNA [11] e redes óticas [12, 13].

Outra notável aplicação foi em uma generalização das operações algébricas básicas [14, 15]. Essa álgebra é conectada com o fato da entropia de Tsallis ser não aditiva. Ela foi definida via propriedades básicas da exponencial e logaritmo. Tal formulação serviu como base de diversos outros desenvolvimentos como por exemplo, uma generalização do teorema do limite central [16, 17] e uma generalização da fórmula de Stirling [18, 19]. No campo da mecânica quântica, a definição de uma derivada generalizada relacionada a essas operações permitiu redefinir a equação de Schroedinger e dos operadores quânticos, fornecendo resultados mais gerais de alguns problemas já conhecidos [20–23].

A mecânica estatística de Tsallis também se apresentou aplicável no estudo de equações de difusão. Particularmente, muitos sistemas que envolvem meios porosos podem ser descritos por uma equação de difusão não linear. Essa equação possui uma solução baseada na q-exponencial. Esse tipo de equação foi muito utilizada no estudo da dinâmica de várias partículas interagentes em movimento superamortecido [24–27]. Dessa forma, é possível conectar essas equações de difusão com a entropia de Tsallis via um teorema-H [28–35]. Isso significa que na mecânica estatística de Tsallis também é possível verificar a forte propriedade de irreversibilidade que é de extrema importância para a termodinâmica. Todos esses sucessos nos estudos dessa mecânica estatística fez com que os trabalhos de Tsallis se tornassem bastante conhecidos. Entretanto, outras tentativas de generalizar a mecânica estatística foram feitas. Uma em particular é a de Kaniadakis [36, 37] que também é baseada em definições de exponenciais e logaritmos generalizados. Entropias que não surgem de generalizações dessas funções também foram propostas, como a de Abe [38] e Rényi [39, 40]. Todos esses exemplos são caracterizados por entropias com um único parâmetro, mas, apesar de menos comum, existem propostas multiparamétricas [41, 42].

Tendo essa apresentação em mente, percebemos que uma mecânica estatística generalizada robusta depende de diversos fatores e conexões para que ela faça sentido fisicamente. Além disso, diversas generalizações podem existir. Dessa forma, neste trabalho, vamos apresentar um formalismo de mecânica estatística generalizada que engloba a usual e a de Tsallis como casos particulares. Para isso, é definido uma forma entrópica generalizada e equações do tipo Fokker-Planck que pode ser lineares ou não lineares. Para tornar o formalismo mais robusto, iremos apresentar um teorema-H generalizado que conecta esses dois conceitos.

O capítulo 1 inicia apresentando a mecânica estatística usual. Começamos discutindo propriedades da entropia de Boltzmann-Gibbs, seguindo para a equação de difusão. Finalizamos esse capítulo demonstrando o teorema-H conectado à equação de Fokker-Planck. A seguir, no capítulo 2, realizamos passos semelhantes ao capítulo anterior, apresentando a forma entrópica de Tsallis e a equação de difusão em meios porosos, que também são conectados por um teorema-H. Definimos também a q-exponencial e q-logaritmo que nos conduz à q-álgebra. No capítulo 3, exibimos a vertente generalizada. Primeiramente, são definidas as equações de Fokker-Planck que quando resolvidas, para solução estacionária, nos permite definir exponenciais e logaritmos generalizados. Então, seguimos definindo uma forma entrópica generalizada que também é conectada com a equação de Fokker-Planck por um teorema-H generalizado. Demonstramos ao longo da apresentação que todos esses conceitos possuem o de Tsallis como caso particular. Para finalizar, no capítulo 4, construímos uma álgebra generalizada inspirada nos logaritmos e exponenciais definidos, que também recuperam o caso de Tsallis. Além disso, ilustramos essa álgebra no contexto de Kaniadakis e de exponenciais alongadas. Ressaltamos que as contribuições mais originais deste trabalho estão apresentadas nos capítulos 3 e 4.

CAPÍTULO 1

Mecânica estatística usual

Neste primeiro capítulo, introduziremos alguns conceitos sobre mecânica estatística (usual) que serão pertinentes para as discussões apresentadas nos capítulos seguintes. O conteúdo aqui apresentado ajudará a fixar a notação utilizada nos estudos subsequentes e promover uma contextualização dos mesmos. Iniciaremos este capítulo considerando a entropia de Boltzmann-Gibbs e certos aspectos básicos relacionados a ela. Particularmente, haverá um enfoque sobre extensividade, princípio de máxima entropia, ensemble microcanônico e ensemble canônico. A seguir, também de maneira breve, discutiremos as equações de difusão usual e de Fokker-Planck, ressaltando soluções estacionárias e a sua conexão com o peso estatístico de Boltzmann-Gibbs. Visando generalizações futuras, ressaltaremos ainda o papel das funções exponencial e logaritmo nessa apresentação introdutória. Deve estar clara a importância desta introdução pois servirá de base para as generalizações consideradas nos capítulos seguintes de formas entrópicas, de equações de Fokker-Planck e de estruturas algébricas.

1.1 Entropia de Boltzmann-Gibbs

Visando apresentar alguns aspectos básicos de mecânica estatística, vamos partir de uma situação simplificada baseada em um conjunto de moedas e, a seguir, generalizá-la. Quando colocamos várias moedas (idênticas e não viciadas) entre nossas mãos e agitamos bastante, verificamos que é equiprovável que cada moeda apresente cara ou coroa. Dito de outra forma, constatamos que a configuração final das moedas é completamente aleatória. Por configuração do conjunto de moedas, entendemos como a especificação de cara ou coroa para cada uma das moedas. Por exemplo, uma configuração hipotética de N moedas poderia ser representada pela N-upla

$$\{1,\, 2,\, 2,\, 1,\, 1,\, 2,\, \cdots,\, 2\}, \tag{1.1}$$

em que, por simplicidade de notação, empregamos 1 para cara e 2 para coroa. Com o objetivo de empregar uma nomenclatura que será estendida para outros contextos, passaremos a denominar configuração do sistema por estado do sistema. No caso em questão, a quantidade de estados possíveis W para o conjunto de moedas é igual a 2^N, pois cada moeda apresenta apenas duas possibilidades (1 ou 2). Além disso, a probabilidade p_i final do i-ésimo estado é

$$p_i = \frac{1}{W} \qquad\qquad (i = 1,\, 2,\, 3,\, \cdots,\, W). \tag{1.2}$$

Uma das muitas possíveis generalizações do caso das moedas seria termos, ao invés das N moedas, um conjunto de N dados idênticos, cada um deles com n faces equiprováveis. Nesse caso, um dos W $(= n^N)$ estados do sistema seria representado por $\{i_1,\, i_2,\, \cdots,\, i_N\}$, com $i_j = 1,\, 2,\, \cdots,\, n$ representando cada uma das n faces do j-ésimo dado. Assim, independentemente do estado inicial e após a agitação do conjunto de dados por um tempo suficientemente longo, a probabilidade final de cada estado é novamente expressa por uma equiprobabilidade, isto é, pela Eq. (1.2).

De uma maneira geral, podemos pensar na possibilidade de sistemas com W estados que se tornam equiprováveis após uma longa evolução temporal. Essa conjectura pode ser considerada como a hipótese fundamental da mecânica estatística, a partir da qual podemos obter as mais diversas consequências, em particular, fornecer uma fundamentação microscópica para a termodinâmica [43]. Nesse caso e no contexto da mecânica quântica, os estados a serem considerados correspondem às autofunções ψ_i da hamiltoniana $\hat{H}$ do sistema, portanto satisfazendo a equação $\hat{H}\psi_i = E_i\psi_i$, em que E_i é a energia associada a ψ_i. Por sua vez, sob o enfoque da mecânica clássica, o estado do sistema é dado pela especificação da posição e do momento de cada partícula que compõe o sistema. Independentemente da dinâmica considerada ser a quântica ou a clássica, o postulado de equiprobabilidade, Eq. (1.2), deve ser aplicado para os estados de um sistema isolado e, portanto, correspondendo a uma dada energia E.

É comum nos depararmos com princípios de maximização (ou, de uma maneira mais geral, extremização) quando estudamos os mais variados ramos da física. No caso da mecânica estatística, essa possibilidade pode ser implementada via a maximização de uma forma entrópica, a entropia de Boltzmann-Gibbs (-Shannon). Essa forma entrópica, que denotaremos por S_{BG} é dada por

$$S_{BG} = -k_B \sum_{k=1}^{W} p_i \ln(p_i) \tag{1.3}$$

em que p_i (com $i = 1,\, 2,\, \cdots,\, W$) é a probabilidade associada ao i-ésimo estado do sistema e k_B é a constante de Boltzmann. Nesse momento, é conveniente ressaltar que, devido a definição de probabilidade, os p_i's satisfazem a condição de normalização

$$\sum_{j=1}^{W} p_j = 1. \tag{1.4}$$

Até o presente momento, as equações exibidas são especialmente úteis para sistemas com número de estados W finito. Entretanto, alguns sistemas apresentam um conjunto infinito de estados acessíveis $(W \to \infty)$. Mais do que isso, há sistemas que exibem um contínuo de estados. Essa última vertente nos leva a empregar uma densidade de probabilidade $\rho(x)$ ao invés de p_j. Como vimos, em contraste com o que ocorre no contexto da mecânica quântica, essa possibilidade faz-se presente quando consideramos um sistema cuja dinâmica é ditada pela mecânica clássica. Assim, por exemplo, a condição de normalização de probabilidade para um conjunto de estados discretos, Eq. (1.4), pode ser substituída por

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)dx = 1. \tag{1.5}$$

Também consistentemente com a possibilidade de um $\rho(x)$, podemos considerar

$$S_{BG} = -k_B \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)\ln(\rho(x))dx \tag{1.6}$$

em substituição a forma entrópica (1.3). Guardadas algumas ressalvas decorrentes de um contínuo de estados, os resultados que envolvem p_j podem ser reobtidos empregando a vertente contínua. Além disso e de uma maneira mais geral, nas Eqs. (1.5) e (1.6), pode-se considerar um $\rho(\bar{x})$ quando há um conjunto de parâmetros contínuos, representados por $\bar{x}$. Esse é justamente o caso da mecânica estatística clássica, pois os estados são rotulados pelas posições e momentos das partículas que compõem o sistema. Visando não parecer repetitivo, a maioria dos resultados que seguem são direcionados a situações que envolvem W estados.

Antes de apresentarmos o princípio de máxima entropia, vamos discutir algumas propriedades de S_{BG}. Primeiramente, notemos que se todos os estados são equiprováveis, $p_i = 1/W$ (Eq. (1.2)), obtemos a fórmula de Boltzmann

$$S = k_B \ln W, \tag{1.7}$$

Como exemplo de um resultado que pode ser obtido dessa fórmula, consideramos um sistema homogêneo que pode ser visto como um conjunto de n partes idênticas, cuja interação entre elas pode ser desconsiderada. Nesse caso, temos $W = (W_0)^n$, em que W_0 é o número de estados de cada uma das partes. Assim, $\ln W$ é proporcional ao número de partes e, portanto, proporcional ao número de partículas, pois cada parte tem uma quantidade dada de partículas. Posto dessa forma, vemos que S é proporcional ao número de partículas. Esse mesmo tipo de proporcionalidade com o número de partículas também está presente na energia U do sistema. Assim, U e S são proporcionais ao número de partículas do sistema, justificando o uso do logaritmo em S e caracterizando a extensividade destas grandezas. A constante k_B é necessária para que a entropia (1.7) corresponda à entropia termodinâmica. Entretanto, também é comum definir a forma entrópica S_{BG} sem a constante k_B.

Dentre as várias propriedades de S_{BG}, Eq. (1.3), nota-se que ela é não negativa, pois $0 \leq p_i \leq 1$ implica que $\ln(p_i) \leq 0$. A seguir, ao invés de nos determos em rotas para obter outras propriedades S_{BG}, nos limitamos a pontuar algumas delas.

(i) S_{BG} **mínimo**: Se todos estados têm probabilidade nula, salvo um de probabilidade igual a 1, então S_{BG} é mínima e igual a 0.

(ii) **Máxima entropia**: Quando todos estados são equiprováveis, a entropia S_{BG} é máxima e igual a $k_B \ln W$.

(iii) **Aditividade**: Se duas partes A e B independentes compõem um sistema $A \cup B$, segue que $S_{BG}^{A\cup B} = S_{BG}^{A} + S_{BG}^{B}$.

(iv) **Expansibilidade**: Ao adicionar um novo estado de probabilidade nula ao sistema, S_{BG} não é alterada, isto é, $S_{BG}(p_1, ..., p_N) = S_{BG}(p_1, ..., p_N, 0)$.

(v) **Concavidade**: Como a função $f(x) = -x\ln(x)$ possui segunda derivada negativa, segue que S_{BG} deve ser côncava.

Antes de concluirmos essa seção, ressaltemos que S_{BG} está diretamente ligada ao conceito de desordem. Se o sistema encontra-se em um único estado, ele está em seu máximo grau de ordenamento e, portanto, de mínima desordem (desordem nula), fornecendo $S_{BG} = 0$, em conformidade com a propriedade (i). Por outro lado, a máxima desordem deve corresponder ao sistema ocupando todos estados com igual peso. Em conformidade com a propriedade (ii), isso realiza-se quando $p_i = 1/W$, conduzindo a $S_{BG} = k_B \ln W$, (1.7). Além dessas aplicações de S em mecânica estatística, há muitas outras em diferentes áreas do conhecimento, particularmente, deve ser ressaltada que ela é largamente empregada no estudo de teoria de informação [44–46].

1.2 Princípio de máxima entropia

Para avançarmos na nossa discussão introdutória sobre mecânica estatística, vamos considerar que a distribuição de equilíbrio é aquela que corresponde à máxima desordem. Dito de outra forma, devemos obter a distribuição de probabilidade dos microestados que maximiza a entropia dada pela Eq. (1.3).

1.2.1 Ensemble microcanônico

Visando implementar a maximização da entropia (1.3), alguns vínculos são necessários. Um primeiro vínculo a ser considerado, e também natural no contexto de probabilidades, é justamente a condição de normalização das probabilidades, dada pela Eq. (1.4). Para incorporar esse vínculo no processo de maximização de S, podemos utilizar o método dos multiplicadores de Lagrange. No presente caso, esse método é implementado empregando uma função auxiliar, que é igual a entropia adicionada de um termo que é igual a uma constante multiplicando o vínculo. Denotando essa função auxiliar por $\mathscr{F}$, temos

$$\mathscr{F} = -k_B \sum_{k=1}^{W} p_i \ln(p_i) - \lambda \left(\sum_{i=1}^{W} p_i - 1 \right), \tag{1.8}$$

em que λ é um multiplicador de Lagrange correspondente ao vínculo (1.4). A seguir, empregamos a condição necessária de extremização sobre a função $\mathscr{F}$, correspondendo a impor que a derivada da função auxiliar em relação a cada uma das variáveis incógnitas seja igual a zero. Assim sendo, verificamos que

$$\frac{\partial \mathscr{F}}{\partial p_j} = -k_B[\ln(p_j) + 1] - \lambda = 0 \qquad (j = 1,\, 2,\, \cdots,\, W). \tag{1.9}$$

Curiosamente, se usássemos a condição $\partial\mathscr{F}/\partial\lambda = 0$, resgataríamos como consequência o vínculo (1.4).

A solução da equação algébrica (1.9) para p_j conduz a

$$p_j = p = e^{-1-\frac{\lambda}{k_B}}, \tag{1.10}$$

que mostra que todos os p_j's são iguais (e igualados a p), consistentemente com o fato de que a entropia (1.3) e o vínculo (1.4) dão pesos iguais para cada probabilidade p_j. Para obter o valor concreto de p_j, usamos novamente o vínculo (1.4):

$$\sum_{j=1}^{W} p_j = Wp = 1, \tag{1.11}$$

e, portanto, $p_j = 1/W$, que é a Eq. (1.2). Apesar de não necessário em desenvolvimentos futuros, obtemos o valor de λ ao substituir esse p_j na Eq. (1.10), o que fornece $\lambda = k_B[1 + \ln(W)]$.

O desenvolvimento que acabamos de apresentar, comumente chamado de *ensemble microcanônico*, indica que para um sistema fechado (energia constante) todos os microestados são equiprováveis. Além disso, ao substituirmos esse p_j na forma entrópica (1.3), reobtemos a Eq. (1.7), que corresponde ao máximo da forma entrópica e, portanto, a entropia do sistema. Assim, a conexão com a termodinâmica é obtida usando essa entropia. Por exemplo, se as variáveis termodinâmicas independentes são a energia interna U e o volume V do sistema, a entropia (1.7) deverá ser escrita em termos dessas duas variáveis, $S = S(U, V)$.

Perceba que se W_1 e W_2 são a quantidade de microestados de dois sistemas distintos independentes A e B, respectivamente, então a quantidade de microestados W do sistema conjunto, $A \cup B$, é igual ao produto W_1W_2. Como consequência da propriedade do logaritmo do produto, a entropia desse sistema composto, $S^{A\cup B}$, é dada por

$$S^{A\cup B} = S^A + S^B, \tag{1.12}$$

em que $S^A = k_B \ln(W_1)$ e $S^B = k_B \ln(W_2)$ são as entropias dos subsistemas A e B, respectivamente. Ou seja, resgatamos a bem conhecida aditividade da entropia para dois sistemas não interagentes.

1.2.2 Ensemble canônico

Se um sistema A está em contato com outro suficientemente grande, a energia de A pode sofrer flutuações em torno de um valor médio. Assim, o máximo que podemos dizer sobre a energia do sistema A é que seu valor médio é dado. Nesse contexto, além da condição de normalização das probabilidades, Eq. (1.4), consideraremos um outro vínculo, ou seja, o valor médio da energia do sistema A, dado por

$$\sum_{j=1}^{W} p_j E_j = U, \tag{1.13}$$

em que U é o valor médio da energia e E_j é a energia do j-ésimo microestado.

Novamente, procedemos utilizando o método de Lagrange, mas dessa vez devemos incluir dois multiplicadores λ_1 e λ_2 para escrever uma nova função auxiliar $\mathscr{F}$. Esse procedimento proporciona

$$\mathscr{F} = -k_B \sum_{k=1}^{W} p_i \ln(p_i) - \lambda_1 \left(\sum_{i=1}^{W} p_i - 1 \right) - \lambda_2 \left(\sum_{i=1}^{W} p_i E_i - U \right). \tag{1.14}$$

Assim como no caso anterior, as equações algébricas para os p_j's são obtidas de $\partial\mathscr{F}/\partial p_j = 0$. Consequentemente, derivando $\mathscr{F}$ com relação a p_j, obtemos

$$\frac{\partial\mathscr{F}}{\partial p_j} = -k_B[\ln(p_j) + 1] - \lambda_1 - \lambda_2 E_j = 0 \qquad (j = 1, 2, \cdots, W). \tag{1.15}$$

A solução dessa equação para probabilidade p_j pode ser escrita como

$$p_j = \frac{1}{Z}\, e^{-\beta E_j}, \tag{1.16}$$

em que $Z = e^{1-\lambda_1/k_B}$ e $\beta = -\lambda_2/k_B$. A exemplo do que foi feito no caso do ensemble microcanônico, podemos eliminar o multiplicador de Lagrange λ_1 via o vínculo (1.4). De fato, esse vínculo leva a

$$\sum_{j=1}^{W} \frac{1}{Z} e^{-\beta E_j} = 1, \tag{1.17}$$

ou seja,

$$Z = \sum_{i=1}^{W} e^{-\beta E_j}. \tag{1.18}$$

O parâmetro β (ou seja, λ_2) deve ser obtido como consequência do vínculo (1.13). Usualmente, β deve ser positivo para que Z possa ser finito. Particularmente, quando o número de microestados é arbitrariamente grande ($W \to \infty$), o lado direito da Eq. (1.18) não converge ao considerarmos casos que os E_j's têm um limite inferior e não apresentam um limite superior.

A função Z é conhecida como função de partição canônica e a partir dela tem-se a conexão com a termodinâmica por meio da energia livre de Helmholtz via a relação

$$A = -\frac{1}{\beta} \ln Z. \tag{1.19}$$

Esse cenário configura o *ensemble canônico*. No que segue, gostaríamos de salientar dois aspectos. Primeiramente, o parâmetro β e a temperatura T estão relacionados pela igualdade $\beta = 1/(k_B T)$. Em segundo lugar, os ensembles microcanônico e canônico (assim como outros ensembles, a exemplo do grande canônico) são equivalentes no estudo de sistemas macroscópicos. Um entendimento desses dois aspectos pode ser obtido via uma comparação da Eq. (1.19) com a energia livre de Helmholtz empregada na termodinâmica,

$$A = U - TS. \tag{1.20}$$

Nesse sentido, reescrevemos a função de partição como $Z = \sum_E W(E) e^{-\beta E}$, em que $W(E)$ é a quantidade de estados com energia E. A seguir, considerando que $\delta U \ll U$, em que δU é o desvio padrão da energia (e U é o seu valor médio), podemos considerar apenas a contribuição principal na soma referente a Z. Nessa aproximação, obtemos $Z = W(U)e^{-\beta U}$ e, portanto, $A = U - S/(k_B\beta)$, em que $S = k_B \ln(W(U))$ é a entropia correspondente a energia U (definida na Eq. (1.7)). Por sua vez, a comparação desse último resultado com a Eq. (1.20) nos direciona à equivalência dos ensembles canônico e microcanônico, assim como a $\beta = 1/(k_B T)$. Por fim, frisamos ainda que outros ensembles igualmente equivalentes poderiam ser empregados, sendo que a escolha de um particular ensemble para investigar um dado sistema é comumente ditada pela facilidade de cálculo.

Até esse ponto, consideramos apenas a vertente de estados discretos. A possibilidade de considerar um $\rho(x)$ ao invés de p_j pode ser diretamente obtida ao substituirmos, por exemplo, $\sum_{j=1}^{W} \cdots$ por $\int_{-\infty}^{\infty} d^n x \cdots$ (n é o número de graus de liberdade), nas Eqs (1.13), (1.14) e (1.18). Particularmente, um exemplo seria empregar

$$U = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) V(x) dx \tag{1.21}$$

para culminar em

$$\rho(x) = \frac{1}{Z} e^{-\beta V(x)} \qquad \left(Z = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta V(x)} dx \right) \tag{1.22}$$

em substituição a Eq. (1.16). Especificamente, se empregarmos o potencial harmônico $V(x) = a(x - x_0)^2/2$, obtemos

$$\rho(x) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\sigma^2}} \exp\left(\frac{-(x - x_0)^2}{2\sigma^2} \right) \qquad \left(\sigma^2 = \frac{a}{\beta} \right), \tag{1.23}$$

que é uma distribuição gaussiana com desvio padrão e média iguais a σ e x_0, respectivamente.

1.3 Interações na mecânica estatística

Uma das principais propriedades da entropia no contexto da mecânica estatística (usual) é sua extensividade. Por exemplo, ao duplicar um sistema, mantendo propriedades das partes imutáveis, os valores da sua energia, do seu volume e da sua entropia são multiplicados por dois. Além disso, dado o grande sucesso na aplicação da mecânica estatística, discutida em inúmeros textos básicos [1,2], pode parecer que ela é válida em geral, particularmente, no que diz respeito a sua extensividade. Na realidade, ela é aplicável com sucesso quando as interações entre as partículas são de alcance suficientemente curto. Dito de outra forma, se as interações são de longo alcance, há dificuldades em aplicar com sucesso a mecânica estatística usual [47]. Nesse último caso, a extensividade, em particular, não parece ser respeitada pelo sistema. Essa situação ilustra a possibilidade de considerar, pelo menos do ponto de vista formal, algumas outras formas entrópicas que em algum sentido generalizam a de Boltzmann-Gibbs, Eq. (1.3). De uma maneira geral, há diversos tipos de aplicações da entropia de Boltzmann-Gibbs que não fornecem uma descrição exata do sistema investigado [3], mais uma vez indicando a conveniência de usar outros tipos de formas entrópicas.

Para exemplificar quantitativamente o que seria uma interação de longo alcance, vamos fazer uso de uma energia potencial repulsiva tipo lei de potência. Mais precisamente, representaremos essa energia potencial por

$$V(r) = \frac{C}{r^\alpha}, \tag{1.24}$$

em que C é uma constante positiva, r é a distância entre duas partículas interagindo (possivelmente em um espaço de dimensão d), α é uma constante positiva que dita o quão a interação é de curto ou longo alcance.

Visando fazer uma investigação simplificada da possibilidade de comportamentos extensivos e não extensivos vinculados a energia total de um sistema, consideramos a energia potencial (1.24) e a linha de raciocínio descrita na Ref. [3]. A energia de interação U_1 de uma partícula com as demais do sistema pode ser escrita como

$$U_1 = \sum_{i(i\neq 1)} V(r_{1i}), \tag{1.25}$$

em que a soma em i leva em conta a interação com as demais partículas e r_{ij} é a distância entre as partículas i e j. Essa soma, supondo uma distribuição uniforme de partículas em uma esfera de raio R, pode ser aproximada por

$$U_1 \propto \int_{R_{\min}}^{R} r^{d-1} r^{-\alpha}\, \mathrm{d}r \propto \frac{N^{1-\alpha/d}-1}{1-\alpha/d}. \tag{1.26}$$

Para obter esse resultado, foram utilizados mais outros dois elementos. Primeiramente, substituímos $\sum_{i(i\neq 1)} \cdots$ por $\int \mathrm{d}^d\bar{r} \cdots$ e usamos o elemento de integração $\mathrm{d}^d\bar{r} = r^{d-1}\mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega_d$, sendo $\mathrm{d}\Omega_d$ o elemento de ângulo sólido no espaço d dimensional. Ademais, visto que o número N das inúmeras partículas que compõem o sistema é proporcional ao volume ocupado por elas, empregamos $N \propto R^d$ e, portanto, $R \propto N^{1/d}$ e $R_{\min} \propto 1$ (correspondendo a uma partícula). Como há N partículas no sistema, a energia total do sistema U é aproximadamente igual a NU_1. Consequentemente, chegamos a

$$\frac{U}{N} \propto \frac{N^{1-\alpha/d}-1}{1-\alpha/d}. \tag{1.27}$$

Desse último resultado e visto que $N \gg 1$, obtemos $U \propto N$ para $\alpha > d$, indicando a extensividade da energia do sistema. Por outro lado, quando $\alpha < d$, vemos que $U \propto N^{2-\alpha/d}$, violando a extensividade. O caso $\alpha = d$ faz com que o lado direito da Eq. (1.27) seja proporcional a $\ln(N)$, pois $\ln(x) = \lim_{a\to 0}(x^a - 1)/a$. Nesse caso, há também violação da extensividade. Esses fatos nos proporcionam uma forma de classificar o tipo de interação a depender dos parâmetros α e d:

(i) se $\frac{\alpha}{d} > 1$, então a interação é de curto alcance;

(ii) se $0 < \frac{\alpha}{d} \leq 1$, então a interação é de longo alcance.

Com essa definição, constatamos imediatamente que a interação gravitacional de Newton, caracterizada por $\alpha = 1$, é uma de longo alcance em um espaço tridimensional ($d = 3$). Assim sendo, não temos a mecânica estatística usual envolvendo apenas interações gravitacionais, o mesmo acontecendo para interações elétricas envolvendo somente cargas de mesmo sinal. Esse raciocínio parece indicar que a mesma dificuldade ocorre com interações elétricas em geral. Entretanto, devido ao caráter atrativo dessa interação para cargas de sinais opostos, há efetivamente a formação de agrupamentos (por exemplo, de átomos e moléculas) que são neutros. Por sua vez, a interação entre esses agrupamentos vai a zero muito mais rapidamente do que $1/r$ para r grande. Essas interações, em muitos casos, são frequentemente aproximadas pelo famoso potencial de Lennard-Jones, que é da forma

$$V(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}, \tag{1.28}$$

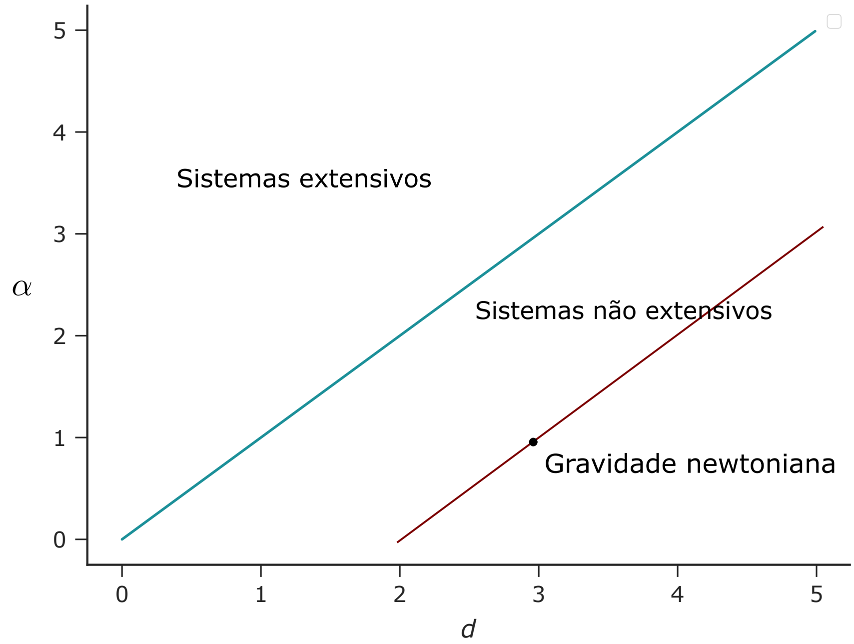

Figura 1.1: Representação dos tipos de interações de acordo com a dimensão d e do tipo de força $1/r^{\alpha}$. Para cima da reta azul a interação é de curto alcance e para baixo a interação é de longo alcance. Imagem adaptada da Ref. [3].

em que $A, B > 0$. Assim, esse $V(x)$ possui comportamento predominante da forma $-r^{-6}$ para r grande e, portanto, $\alpha = 6$, representando uma interação de curto alcance na situação usual, $d = 3$. A figura (1.1) ilustra as regiões que definem o tipo de sistema considerado. Acima da reta azul, o coeficiente α e a dimensão d definem um sistema extensivo caracterizado por interação de curto alcance. Abaixo dessa reta, a interação é de longo alcance e o sistema é não extensivo.

1.4 Difusão e equação de Fokker-Planck

Nas seções anteriores, discutimos de uma maneira bastante formal alguns aspectos da mecânica estatística de equilíbrio. Partimos da noção de forma entrópica e culminamos no princípio de máxima entropia para obter distribuições de probabilidade de equilíbrio. A seguir, discutiremos brevemente como um sistema evolui no tempo em direção ao estado de equilíbrio. Nesse sentido, começaremos por uma discussão fenomenológica que culminará na equação de difusão. Particularmente, um foco especial será dado para obtenção da solução de equilíbrio dessa equação. Prosseguiremos nossos estudos fazendo uma conexão entre a equação de difusão e a equação de Fokker-Planck, mostrando que essas equações têm a mesma forma. Ressaltaremos também a visão microscópica de que a dinâmica das partículas apresenta alto grau de aleatoriedade, usualmente chamado de movimento browniano.

1.4.1 Difusão

Verifica-se experimentalmente que porções concentradas de um sistema tendem, com passar do tempo, a ficarem menos aglomeradas, que é consistente com a direção de aumento da entropia. Esse é o caso, por exemplo, de uma gota de tinta que entra em contato com uma grande porção de água. Para descrever essa tendência, podemos pensar em um material que tem uma densidade ρ e que quanto maior a não uniformidade de ρ, maior a tendência de haver uma corrente de matéria no sentido de diminuir essa inomogeneidade manifestada em ρ. Por outro lado, como sabemos, quanto maiores os módulos das derivadas de uma função, maiores os desvios do comportamento constante. Se ρ é aproximadamente constante, podemos considerar que a sua primeira derivada já seria suficiente para indicar majoritariamente o seu grau de não uniformidade. No caso unidimensional, por exemplo, a corrente J de matéria pode ser pensada aproximadamente proporcional à derivada de ρ em relação a posição. Além disso, esse fator de proporcionalidade deve ser negativo, pois a corrente J deve ir na direção oposta da concentração para que exista uma tendência de homogenização do sistema. Essas hipóteses podem ser resumidas na relação

$$J = -D\frac{\partial \rho}{\partial x}, \tag{1.29}$$

em que $\rho = \rho(x, t)$ e D é um fator de proporcionalidade positivo, conhecido como constante de difusão. Esse resultado pode ser diretamente estendido para o caso tridimensional, proporcionando

$$\vec{J} = -D\nabla\rho, \tag{1.30}$$

em que $\vec{J}$ é o vetor densidade de corrente de matéria e $\rho = \rho(\vec{r}, t)$. Essa última equação fenomenológica, conhecida como lei de Fick, é válida quando as propriedades básicas de difusão iguais não dependem da direção (meios isotrópicos).

Uma situação bastante comum quando há uma matéria com densidade ρ é que ela seja conservada ao longo do tempo. Por outro lado, tem-se a equação de continuidade,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0, \tag{1.31}$$

quando uma matéria com densidade ρ é conservada. Por sua vez, a incorporação da lei de Fick (1.30) na Eq. (1.31) conduz à equação de difusão

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D\nabla^2\rho, \tag{1.32}$$

que dita a dinâmica difusiva do sistema.

Apesar de focarmos pouco no comportamento temporal relacionado a Eq. (1.32) ao longo deste texto, apresentamos alguns aspectos sobre esse tema. Nesse sentido, voltando para o caso unidimensional, é natural aproximarmos a condição inicial por $\rho(x, 0) = \delta(x)$ para indicar que inicialmente a matéria está concentrada em um ponto do sistema. Supondo que a quantidade total de matéria é igual a unidade (ρ normalizado) e que ela está contida em uma região muito grande (podendo usar $-\infty < x < \infty$), verificamos que a distribuição gaussiana (Eq. (1.23))

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}}\, e^{\frac{-x^2}{4Dt}} \tag{1.33}$$

é solução da equação de difusão unidimensional

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D\frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}. \tag{1.34}$$

Essa distribuição mostra que, com o passar do tempo, há uma redução sistemática da concentração na parte central e um deslocamento simétrico para as regiões periféricas. Isso é, portanto, consistente com a afirmação de que a difusão ocorre de forma a homogenizar a distribuição. Mais ainda, podemos calcular o segundo momento da distribuição (correspondendo à variância, pois o valor médio de x é nulo), que é dado por

$$\left\langle x^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \rho(x,t) dx = 2Dt. \tag{1.35}$$

Este resultado mostra que há um comportamento linear no tempo t nesse tipo de difusão. Também podemos reescrever a relação na Eq. (1.35) como $\langle x^2 \rangle \propto t^\alpha$, em que o comportamento linear corresponde a $\alpha = 1$. Entretanto, existem outros contextos difusivos que proporcionam $\alpha \neq 1$. Nesses casos, dizemos que a difusão é anômala e, particularmente, se $\alpha < 1$ ($\alpha > 1$), temos um processo subdifusivo (superdifusivo).

Até esse ponto da nossa discussão a difusão considerada está livre de agentes externos. Entretanto, o sistema pode estar sujeito a uma força externa F que, portanto, deve ser incorporada na descrição do processo difusivo. Isso pode ser feito adicionando um termo relacionado à força externa na corrente J, modificando a Eq. (1.29) para

$$J = -D\frac{\partial \rho}{\partial x} + F\rho. \tag{1.36}$$

Uma justificativa para a inserção de $F\rho$ está calcada na relação $J = v\rho$, em que v é a velocidade. Se em um conjunto de partículas, consideramos que qualquer uma delas tem sua dinâmica ditada por $ma = -\alpha v + f$ ($-\alpha v$ representa a força de atrito e f a força externa), obtemos $v = f/\alpha$ no regime estacionário. Assim, denotando f/α por F, chegamos ao termo $F\rho$ em J. Apesar da presença da constante α na definição de F, chamaremos F de força, por simplicidade. Logo, o uso da Eq. (1.36) na equação de continuidade (1.31) nos proporciona a equação de difusão

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D\frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} - \frac{\partial (F\rho)}{\partial x}. \tag{1.37}$$

Analogamente, poderíamos obter a equação para $\rho(\bar{x}, t)$. É conveniente ainda enfatizar que, diferente dos casos obtidos em outros capítulos, essa equação é linear.

A seguir, consideraremos o comportamento de um sistema sobre essas condições após um longo tempo. Enquanto o sistema tende a uma homogenização no caso em que não há força externa, o comportamento estacionário é influenciado pela presença de F. Considerando que essa força depende apenas da posição x, $F = F(x)$, podemos escrever, no caso estacionário, $\rho = \rho(x)$ na Eq. (1.37). Assim sendo, somos conduzidos à equação diferencial

$$D\frac{d^2\rho}{dx^2} - \frac{d(F\rho)}{dx} = 0, \tag{1.38}$$

ou seja,

$$\frac{d}{dx}\left[D\frac{d\rho}{dx} - F(x)\rho\right] = 0. \tag{1.39}$$

Consequentemente, o termo dentro dos colchetes é igual a uma constante c.

Se F é uma força confinante, podemos supor que $\rho(x)$ e $d\rho(x)/dx$ são nulos a uma distância muito grande da localização do sistema. Portanto, empregaremos as condições de contorno $\rho(x) = 0$ e $d\rho(x)/dx = 0$ quando $x \to \pm\infty$. Agregando essas observações, certificamos que $c = 0$ e a equação estacionária (1.39) é reduzida a

$$D\frac{d\rho}{dx} = F\rho, \tag{1.40}$$

que, por sua vez, conduz a

$$D\int_{\rho_0}^{\rho}\frac{d\rho'}{\rho'} = \int_0^x F(x')dx'. \tag{1.41}$$

Como $F(x)$ faz o papel de uma força externa, supostamente conservativa, podemos associá-la a um potencial $V(x)$, dado por

$$V(x) = -\int_0^x F(x')dx', \tag{1.42}$$

levando a $V(0) = 0$. Com essa definição, e resolvendo a integral do lado esquerdo da Eq. (1.41), concluímos que a solução da equação estacionária pode ser escrita como

$$\rho(x) = \rho_0\, e^{-\frac{V(x)}{D}}. \tag{1.43}$$

Para um dado sistema, percebamos que esse último resultado e a Eq. (1.22) devem representar a mesma distribuição, pois a solução estacionária da Eq. (1.37) deve corresponder a solução de equilíbrio termodinâmico (a de máxima entropia). Desse modo, somos dirigidos a $D = k_BT$, que é a conhecida relação de Einstein. Como esperado, quando não há força externa ($V(x) = 0$), a solução estacionária é a constante ρ_0, se o sistema é confinado a uma região finita. Por outro lado, com a presença do potencial, a distribuição da solução estacionária é ditada pelas funções exponencial e $V(x)$. Particularmente, se o sistema está sob a ação do potencial harmônico $V(x) = \gamma x^2/2$, a Eq. (1.43) se torna

$$\rho(x) = \rho_0 e^{-\frac{\gamma x^2}{2D}}, \tag{1.44}$$

que é uma solução gaussiana. A interpretação desse resultado é análoga àquela da Eq. (1.33), ou seja, o comportamento estacionário de ρ é caracterizado por uma concentração central e simétrica que decai e vai para zero com $x \to -\infty$ e $x \to \infty$.

1.4.2 Equação de Fokker-Planck

Ao se estudar sistemas físicos que são descritos por uma função de probabilidade, é natural imaginar que tal probabilidade possa evoluir no tempo a medida que o próprio sistema evolui. Dessa forma, além de ser uma função da posição, ela deve ser função do tempo e, no caso unidimensional, temos $\rho = \rho(x,t)$. Uma das principais abordagens nesse contexto é a equação de Fokker-Planck que descreve tal evolução temporal.

Um exemplo de dinâmica que pode ser vista como probabilística é o problema da caminhada aleatória de uma partícula interagindo com outras partículas em um meio via sucessivas colisões. Deve ser notado que essa dinâmica está relacionada com a equação de difusão. Para entender essa conexão, consideremos um conjunto de N partículas suficientemente diluídas em um meio. Assim, a densidade de matéria $\rho(x,t)$ dessas partículas é $Nm\tilde{\rho}(x,t)$, em que $\tilde{\rho}(x,t)$ é a densidade de probabilidade de encontrar uma partícula na posição x e no tempo t. Devido a linearidade da equação de difusão, Eq. (1.37), segue que a equação para $\rho(x,t)$, que é a equação de Fokker-Planck, é idêntica a equação de difusão

$$\frac{\partial \tilde{\rho}(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial x} \qquad \left(J = D\frac{\partial \tilde{\rho}(x,t)}{\partial x} - F\tilde{\rho}(x,t)\right). \tag{1.45}$$

Para avançar nossos estudos, não necessitamos considerar muitos dos aspectos metodológicos vinculados à equação de Fokker-Planck (linear), sendo assim, não nos aprofundaremos nessa vertente [48]. Além disso, visando não carregar a notação, iremos utilizar simplesmente $\rho(x,t)$ para densidade de massa ou de partícula, o contexto deixará claro sobre qual estamos tratando.

1.5 Teorema-H e tendência ao equilíbrio

Até esse ponto, apresentamos dois aspectos da mecânica estatística (equação de Fokker-Planck e entropia de Boltzmann-Gibbs) como conceitos que podem parecer pouco conectados. Nesta seção, vamos introduzir um resultado que junta esses dois aspectos. Esse resultado é conhecido como teorema-H. O objetivo é demonstrar que existe uma quantidade, denotada por A, que representa um tipo de energia livre do sistema que sempre diminui de forma a tender a um equilíbrio.

Para prosseguir, vamos considerar um sistema, sofrendo interação de uma força $F(x)$, cujos estados são descritos pela densidade de probabilidade dependente da posição e do tempo, $\rho = \rho(x,t)$. Como deve estar claro, a partir da discussão do final seção anterior, esse $\rho(x,t)$ obedece a equação de Fokker-Planck, dada pela Eq. (1.45). Assim, temos

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 \rho(x,t)}{\partial x^2} - \frac{\partial (F(x)\rho(x,t))}{\partial x}. \tag{1.46}$$

Nesta seção, deixaremos explícito as dependências de ρ para enfatizar que essa função não precisa corresponder ao equilíbrio. Além disso, vamos definir uma quantidade A, similar a energia livre de Helmholtz do sistema, dada por

$$A = U - TS = \int_{-\infty}^{\infty} [V(x)\rho(x,t) - k_B T\rho(x,t)\ln\rho(x,t)]dx. \tag{1.47}$$

Esses A, U, T e S coincidem com os da Eq. (1.20) quando o sistema está em equilíbrio. Como a integral é realizada na variável x, essa grandeza é um funcional de $\rho(x,t)$. Isso significa que ela está definida mesmo quando o sistema ainda não está no equilíbrio. Com isso, derivando A em relação ao tempo, temos

$$\begin{aligned}
\frac{dA}{dt} &= \frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} [V(x)\rho(x,t) - k_B T\rho(x,t)\ln\rho(x,t)]dx && (1.48)\\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t}[V(x)\rho(x,t) - k_B T\rho(x,t)\ln\rho(x,t)]dx && (1.49)\\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t}[V(x) - k_B T(1+\ln\rho(x,t))]dx. && (1.50)
\end{aligned}$$

Utilizando a suposição de que a dinâmica do sistema é ditada pela Eq. (1.46), podemos substituir a derivada temporal de $\rho(x,t)$ para obter

$$\frac{dA}{dt} = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x}\left[D\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial x} - F(x)\rho(x,t)\right][V(x) - k_BT(1+\ln\rho(x,t))]dx. \tag{1.51}$$

Realizando uma integração por partes, podemos reescrever dA/dt como

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dt} &= -\left[D\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial x} - F(x)\rho(x,t)\right][V(x) - k_BT(1+\ln\rho(x,t))]\Bigg|_{-\infty}^{\infty} \\ &+\int_{-\infty}^{\infty}\left[D\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial x} - F(x)\rho(x,t)\right]\frac{\partial}{\partial x}[V(x) - k_BT(1+\ln\rho(x,t))]dx. \end{aligned} \tag{1.52}$$

Supondo que $F(x)$ confina o sistema em uma região, somos levados a condição de contorno na qual $\rho(x,t)$ e $d\rho(x,t)/dt$ devem tender a zero quando $x \to \infty$ e $x \to -\infty$. Nesse caso, o primeiro termo do lado direito da igualdade (quando aplicado os limites) é igual a zero e, portanto,

$$\frac{dA}{dt} = \int_{-\infty}^{\infty}\left[D\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial x} - F(x)\rho(x,t)\right]\left[-F(x) - \frac{k_BT}{\rho(x,t)}\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial x}\right]dx \tag{1.53}$$

Esse resultado pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dt} &= -\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\rho(x,t)}\left[D\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial x} - F(x)\rho(x,t)\right]^2 dx \\ &= -\int_{-\infty}^{\infty}\frac{J^2}{\rho(x,t)}\,dx \leq 0, \end{aligned} \tag{1.54}$$

quando $D = k_BT$, que é a relação de Einstein já obtida. Portanto, a variação de A, enquanto evolui no tempo, é sempre negativa, o que nos leva a concluir que essa grandeza tende sempre a uma diminuição, que é consistente com a possibilidade de chegar a um estado de equilíbrio quando $dA/dt = 0$.

Esse resultado possui uma forte ligação com a termodinâmica via a segunda lei, uma vez que ele descreve uma tendência do sistema ao equilíbrio. Além disso, como temos uma quantidade que apenas diminui com a evolução temporal, é possível associar isso a uma irreversibilidade.

CAPÍTULO 2

Mecânica estatística de Tsallis

Como exposto no capítulo anterior, alguns sistemas não são bem descritos pelo formalismo da mecânica estatística usual, deixando em aberto a possibilidade para uma outra teoria que explique esse problema. Neste capítulo, iremos expor uma das propostas de generalização da mecânica estatística. Muitos dos trabalhos nesse campo são devidos a Constantino Tsallis e por isso é comum chamar essa generalização de mecânica estatística de Tsallis. Nessa estatística, um dos grandes motivadores de trabalhos adjacentes é a generalização de funções exponencial e logaritmo. Veremos também que na estatística de Tsallis há uma conexão com uma forma generalizada não linear da equação de Fokker-Planck.

2.1 Entropia de Tsallis

Nesta seção, vamos iniciar apresentando a q-entropia denotada por S_q. Dado um sistema que possui W estados, tal entropia é definida como

$$S_q = k\frac{1 - \sum_{i=1}^{W} p_i^q}{q - 1}, \tag{2.1}$$

em que p_i é a probabilidade do i-ésimo estado e k é a uma constante que deve se reduzir à de Boltzmann no caso usual. Essa entropia é uma generalização da entropia de Boltzmann-Gibbs pois quando tomamos o limite $q \to 1$, retornamos a entropia usual. Percebemos rapidamente que essa entropia não é aditiva uma vez que se tivermos dois estados independentes cuja probabilidade conjunta é dada por $p_i p_j'$, a entropia não separa na soma de cada entropia. Essa distinta característica torna ela especial e vai inspirar a introdução de uma álgebra generalizada como veremos depois. Assim como a forma entrópica de Boltzmann-Gibbs possui algumas propriedades, S_q também tem algumas análogas. Abaixo listamos quatro:

(i) **S_q é não negativa**

No caso em que $0 < q < 1$, como $\sum_{i=1}^{W} p_i = 1$, então $\sum_{i=1}^{W} p_i^q > 1$ e, portanto $S_q \geq 0$. Por outro lado, se $q > 1$, então $1 - \sum_{i=1}^{W} p_i^q < 0$ e $q - 1 < 0$ conduzem a $S_q \geq 0$.

(ii) **Expansibilidade**

Uma das propriedades que esperamos de uma entropia é a expansibilidade, ou seja, se adicionarmos um estado cuja probabilidade de ser acessado é nula, então a entropia não pode ser alterada. Nesse caso, é fácil observar que

$$S_q(p_1, ..., p_N) = S_q(p_1, ..., p_N, 0) \tag{2.2}$$

se $q > 0$.

(iii) **Concavidade**

Como a função $f(x) = (x - x^q)/(q-1)$ possui segunda derivada positiva (negativa) se $q < 0$ ($q > 0$), então a entropia S_q é concava (convexa) se $q > 0$ ($q < 0$).

(iv) **Lesche estável**

Uma importante propriedade que a entropia de Tsallis obedece é a estabilidade de Lesche. Essa estabilidade afirma que pequenas variações na probabilidade do sistema, não deve alterar a entropia. Matematicamente isso significa que

$$|p - p'| < \delta \rightarrow \frac{S_q(p) - S_q(p')}{S_q^{\max}} < \epsilon \tag{2.3}$$

para qualquer valor de ϵ e δ [49]. Existem outras propostas de entropia generalizadas como a de Rényi e de Abe que não respeitam essa propriedade.

Como forma de exemplificar algumas propriedades acima, podemos utilizar um sistema de dois estados em que a probabilidade de um deles é p e, consequentemente, a do outro é $1-p$. Nesse caso, a entropia S_q é dada por

$$S_q = \frac{1 - p^{1-q} - (1-p)^{1-q}}{q-1}. \tag{2.4}$$

Como ela depende apenas de p podemos fazer um gráfico de S_q em função de p como representado na figura 2.1.

Assim como no caso da entropia de Boltzmann-Gibbs, o estado de equilíbrio é dado pela extremização da entropia. Mais uma vez, iremos utilizar o método dos multiplicadores de Lagrange para encontrar esses estados.

Ensemble microcanônico

Vamos considerar que existe o vínculo das probabilidades, ou seja, aquele dado pela Eq. (1.4). Nesse caso, obtemos a seguinte função auxiliar

$$\mathscr{F} = k\frac{1 - \sum_{i=1}^{W} p_i^q}{q-1} + \gamma\left(\sum_{i=1}^{W} p_i - 1\right). \tag{2.5}$$

Derivando $\mathscr{F}$ em relação a p_j e igualando a 0, temos

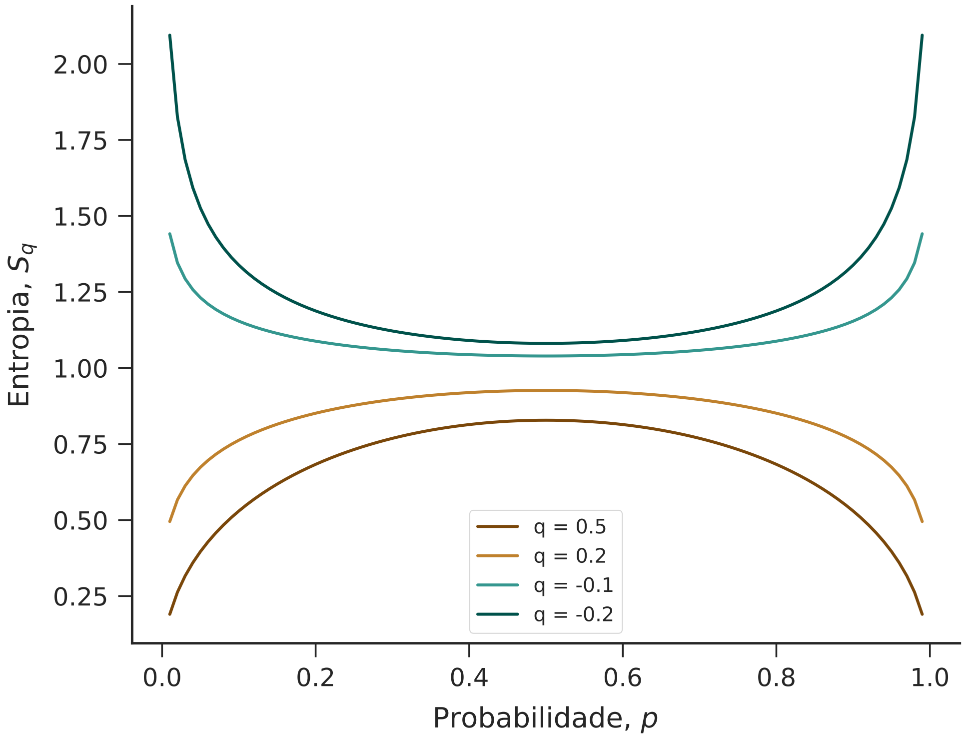

Figura 2.1: Gráfico ilustrando a entropia S_q de um sistema de dois estados, um com probabilidade p e o outro de probabilidade $1-p$. Para valores de $q>0$ observa-se que a entropia é concava e, para $q<0$, ela é convexa.

$$-\frac{q}{q-1}p_j^{q-1}+\gamma=0, \tag{2.6}$$

e, portanto, p_j deve ser igual para todos os estados. Utilizando novamente o vínculo (1.4), concluímos que $p_j = 1/W$. Substituindo na entropia S_q, chegamos a

$$S_q = -k\,\frac{W^{1-q}-1}{1-q}. \tag{2.7}$$

Esse resultado nos permite ver facilmente que essa entropia não é aditiva para $q\neq 1$ uma vez que, dados dois sistemas A e B distintos, temos

$$S_q(A+B) = S_q(A)+S_q(B)+(1-q)S_q(A)S_q(B). \tag{2.8}$$

Naturalmente, para $q=1$, Eq. (2.7) retorna para entropia usual $S=k\ln W$, que é o único valor de q que conduz a aditividade.

Ensemble canônico

Vamos fazer a mesma análise de maximização da entropia mas dessa vez considerando que, além do vínculo de normalização das probabilidades, também existe um vínculo em relação a energia interna. Entretanto, aqui, vamos considerar dois vínculos diferentes.

(i) Para o primeiro caso, considere que o vínculo da energia é dado sobre suas médias, ou seja, o mesmo da Eq. (1.13). Nessa direção, a função auxiliar que queremos extremizar é

$$\mathscr{F} = \frac{1-\sum_{i=1}^{W} p_i^q}{q-1} - \beta\left(\sum_{i=1}^{W} p_i E_i - U\right) - \lambda\left(\sum_{i=1}^{W} p_i - 1\right). \tag{2.9}$$

Derivando esse $\mathscr{F}$ em relação a p_j e igualando a zero, encontramos que p_j deve ser dado por

$$p_j = \left[(-\lambda - \beta E_j)\left(\frac{q-1}{q}\right)\right]^{1/(q-1)}. \tag{2.10}$$

Essa última equação pode ser reescrita de uma forma mais conveniente como segue

$$p_j = \frac{1}{Z}[1-(1-\tilde{q})\beta' E_j]^{\frac{1}{1-\tilde{q}}}, \tag{2.11}$$

em que $Z = [(1-q)/(q\lambda)]^{1/(q-1)}$, $\beta' = \beta/[(1-q)\lambda]$ e $\tilde{q} = 2-q$.

(ii) O segundo vínculo que consideramos sobre a energia substitui a média da energia por outra forma generalizada dela. Ela é dada por

$$\sum_{i=1}^{W} p_i^q E_i = U, \tag{2.12}$$

de forma que a função auxiliar é dada por

$$\mathscr{F} = \frac{1-\sum_{i=1}^{W} p_i^q}{q-1} + \beta\left(\sum_{i=1}^{W} p_i^q E_i - U\right) - \lambda\left(\sum_{i=1}^{W} p_i - 1\right). \tag{2.13}$$

Empregando $\partial\mathscr{F}/\partial p_j = 0$, encontramos que p_j deve ser $p_j = [\alpha(q-1)/q]^{1/(q-1)}[1-(1-q)\beta E_j]^{1/(1-q)}$. Usando o vínculo das probabilidades, obtemos

$$p_j = \frac{[1-(1-q)\beta E_j]^{1/(1-q)}}{Z_q} \tag{2.14}$$

em que

$$Z_q = \left(\frac{\alpha(q+1)}{q}\right)^{1/(q-1)} = \sum_{i=1}^{W}[1-(1-q)\beta E_j]^{1/(1-q)}. \tag{2.15}$$

Z_q é uma função de partição canônica generalizada.

(iii) Uma terceira possibilidade de vínculo relacionado à energia é

$$\sum_{j=1}^{W} \frac{p_j^q}{\sum_{i=1}^{W} p_i^q} E_j = U. \tag{2.16}$$

Perceba que, no caso anterior, um inconveniente da "média"da energia é que a soma dos pesos não é igual a um. No presente caso, esse inconveniente é eliminado [3,50]. Com esse novo vínculo, a função $\mathscr{F}$ se torna

$$\mathscr{F} = \frac{1-\sum_{i=1}^{W} p_i^q}{q-1} - \beta\left(\sum_{j=1}^{W} \frac{p_j^q}{\sum_{i=1}^{W} p_i^q} E_j - U\right) - \lambda\left(\sum_{i=1}^{W} p_i - 1\right). \tag{2.17}$$

Impondo a condição $\partial\mathscr{F}/\partial p_j = 0$, obtemos que a probabilidade p_j é dada por

$$p_j = \frac{1}{Z}\left[1 - \tilde{\beta}(1-q)(E_j - U)\right]^{\frac{1}{1-q}}, \tag{2.18}$$

em que $\tilde{\beta}$ é um parâmetro depende de β e λ.

O primeiro caso é o mais intuitivo de se considerar pois esperamos que a média da energia interna deve ser dada pela média usual uma vez que a própria soma das probabilidades deve continuar sendo 1. O segundo se torna mais abstrato uma vez que não temos mais a média usual no termo da energia. Entretanto perceba que obtivemos resultados semelhantes, sendo que a principal diferença está na mudança do índice q. Isso indica uma simetria entre os valores q e $2-q$ nos índices entrópicos. O terceiro caso continua abstrato por também não possuir a média usual, mas é uma tentativa de corrigir a soma dos pesos do caso 2. Ele é interessante por possibilitar a fatoração de um dos multiplicadores de Lagrange e, portanto, permitindo eliminá-lo.

2.2 q-exponencial e q-logaritmo

A princípio, os conceitos introduzidos acima podem não relembrar imediatamente as usuais. Nessas três vertentes, todos resultados recaem aos já conhecidos no caso limite $q \to 1$ e podemos estender um paralelo entre as mecânicas estatísticas de Tsallis e a de Boltzmann-Gibbs. Para fazer isso, vamos definir uma função monoparamétrica inspirada pela distribuição da Eq. (2.14):

$$e_q^x = [1 + (1-q)x]_+^{\frac{1}{1-q}}, \tag{2.19}$$

em que $[z]_+ = z$ para $z > 0$ e $[z]_+ = 0$ para $z \leq 0$. Essa função é conhecida como q-exponencial e sua inversa é dada por

$$\ln_q(x) = \frac{x^{1-q} - 1}{1-q}, \tag{2.20}$$

conhecida como q-logaritmo. Perceba que quando $q \to 1$, a q-exponencial retorna para exponencial usual assim como o q-logaritmo para o logaritmo usual. Com essas funções, podemos reescrever a Eq. (2.14) como

$$p_j = \frac{e_q^{-\beta E_j}}{Z_q} \tag{2.21}$$

Por outro lado, a entropia S_q na Eq. (2.1) pode ser reescrita como

$$S_q = k\sum_{i=1}^{W} p_i \ln_q\left(\frac{1}{p_i}\right) \tag{2.22}$$

Assim, a entropia obtida na Eq. (2.7) do ensemble microcanônico é escrita na forma

$$S_q = k \ln_q W. \tag{2.23}$$

Definindo essas funções, fica claro a semelhança entre os resultados da mecânica estatística usual com a vertente de Tsallis. Outra forma de obter essa generalização da exponencial é através de uma analogia com equações diferenciais. Nesse sentido, sabemos que a equação diferencial que a exponencial satisfaz é

$$\frac{dy}{dx} = y. \tag{2.24}$$

Uma generalização dela é

$$\frac{dy}{dx} = y^q \tag{2.25}$$

de modo que quando $q = 1$ retornamos para equação (2.24). A solução da Eq. (2.25) é justamente $y = e_q^x$, enquanto sua inversa pode ser escrita na forma integral

$$x = \int_1^y \frac{dy'}{y'^q} = \ln_q y. \tag{2.26}$$

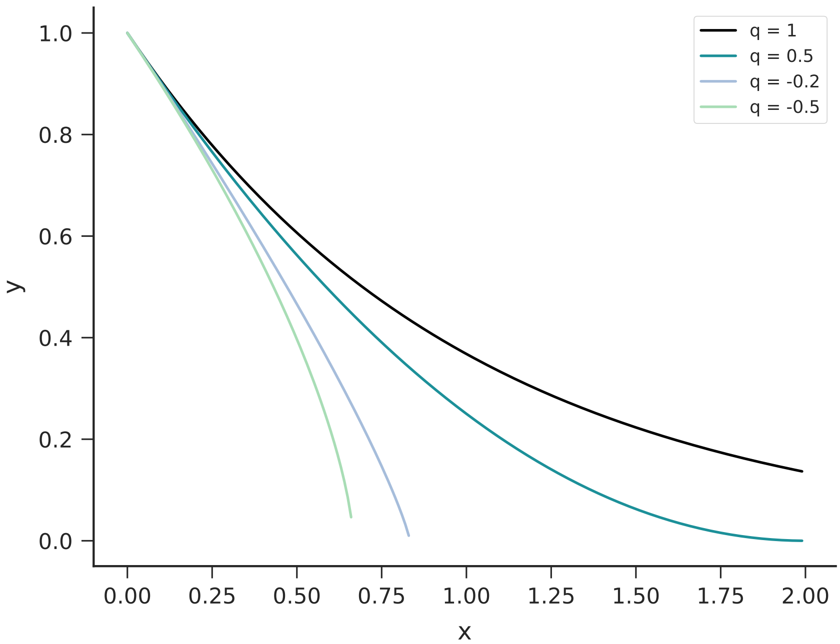

Figura 2.2: Gráfico representando a função $y = e_q^{-x}$ para diferentes valores de q, especificamente, $q = -0.5$, -0.2, 0.5 e 1.

Como representado na figura 2.2, perceba que, curiosamente, a q-exponencial possui valores nulos quando $q < 1$, dado a partir de $x = 1/(q-1)$, e se trocarmos o argumento da função por $-x$, isto ocorre a partir de $x = 1/(1-q)$. Isso caracteriza a cauda de cada uma dessas q-exponenciais, em particular, quanto menor (maior) o valor de q, menor (maior) a cauda da função. Quanto mais próximo de 1 é o valor de q, mais a função lembra a exponencial, sendo que maiores valores representam desvios maiores. Por isso também dizemos que a q-exponencial é uma deformação da exponencial. Isso permite que sistemas apresentando comportamento próximo da exponencial sejam, possivelmente, bem descritos por essa generalização. Em particular, foram aplicados ajustes via q-exponencial para estudos relacionados a mercado de ações [51,52], terremotos [53–55] e diversos outros sistemas [5].

Vale ressaltar que uma importante propriedade do logaritmo é sua transformação de produto em soma, ou seja, dados dois reais x e y:

$$\ln(xy) = \ln(x) + \ln(y). \tag{2.27}$$

Entretanto, para o q-logaritmo essa propriedade é generalizada na forma

$$\ln_q(xy) = \ln_q(x) + \ln_q(y) + (1-q)\ln_q(x)\ln_q(y). \tag{2.28}$$

Essa propriedade combinada com a Eq. (2.22), nos permite reobter o resultado da Eq. (2.8). Veremos que essa será uma das principais inspirações para obtenção de uma álgebra generalizada.

2.3 Equação de difusão em meios porosos

No capítulo 1, foi brevemente discutida a equação de difusão usual e como ela está relacionada com a forma entrópica de Boltzmann-Gibbs. De forma similar, iremos apresentar uma generalização da equação de Fokker-Planck que possui forte relação com a estatística de Tsallis [56]. A equação é dada por

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2[\rho(x,t)]^\nu}{\partial x^2}, \tag{2.29}$$

em que ν é uma constante real e D é o coeficiente de difusão. Essa é uma generalização não linear da equação de Fokker-Planck que retorna para o caso usual quando $\nu = 1$. Essa equação também é conhecida como equação de meios porosos e encontrou diversas aplicações. Uma das mais populares é quando se trata do fluxo de um gás ou líquido em um meio poroso [57,58]. Para prosseguir, vamos fazer uma modificação nessa equação. O termo da direita pode ser reescrito como

$$D\frac{\partial^2[\rho(x,t)]^\nu}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\nu D\rho^{\nu-1}\frac{\partial \rho}{\partial x}\right), \tag{2.30}$$

que nos leva a equação

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\nu D\rho^{\nu-1}\frac{\partial \rho}{\partial x}\right). \tag{2.31}$$

Nessa seção, estamos interessados apenas na solução de sistemas no estado estacionário e para fazer essa investigação precisamos incluir um termo de força externa. No mesmo sentido da equação de difusão usual com termo de força externa, a Eq. (2.29) se torna

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\nu D\rho^{\nu-1}\frac{\partial \rho}{\partial x}\right) - \frac{\partial (F\rho)}{\partial x}. \tag{2.32}$$

No estado estacionário, a solução não depende de t e o lado esquerdo da igualdade deve ser igual a zero enquanto as derivadas parciais se tornam ordinárias. Assim, temos

$$\frac{d}{dx}\left[\nu D\rho^{\nu-1}\frac{d\rho}{dx} - F\rho\right] = 0. \tag{2.33}$$

O termo dentro do colchete pode ser igualado a uma constante c. Entretanto, vamos fazer a mesma suposição que fizemos no caso da difusão usual em que o estado deve ser localizado, ou seja, $\rho(x) \to 0$ e $d\rho/dx \to 0$ quando $x \to \infty$ e $x \to -\infty$. Isso nos leva a relação

$$\nu D\rho^{\nu-1}\frac{d\rho}{dx} = F\rho. \tag{2.34}$$

Tomando $\rho(0) = \rho_0$ e escrevendo o potencial associado a F, via a relação $F(x) = -dV(x)/dx$, a solução da Eq. (2.34) se torna

$$\rho(x) = \rho_0\,[1-(\nu-1)bV(x)]^{\frac{1}{\nu-1}}\,, \tag{2.35}$$

em que $b = 1/(\nu D\rho_0^{\nu-1})$ e $V(x) = -\int_0^x F(x')dx'$. Essa solução pode ser reescrita em termos da q-exponencial como

$$\rho(x) = \rho_0\, e_{2-\nu}^{-bV(x)}. \tag{2.36}$$

Para simplificar a identificação com a q-exponencial, podemos substituir ν por q fazendo $q = 2-\nu$ que leva a

$$\rho(x) = \rho_0\, e_q^{-bV(x)}. \tag{2.37}$$

Portanto, a solução da equação de meios porosos corresponde a uma q-exponencial, análoga à solução obtida na Eq. (1.43). Novamente essa solução depende da forma do potencial. Por exemplo, quando consideramos um potencial harmônico ($V(x) = \gamma x^2/2$), obtemos

$$\rho(x) = \rho_0\, e_q^{-b\frac{\gamma x^2}{2}}. \tag{2.38}$$

Perceba que essa solução é uma generalização da distribuição gaussiana. Por esse motivo, chamamos essa solução de q-gaussiana, retornando ao caso usual quando $q \to 1$. Na figura 2.3, ilustramos essa distribuição para alguns valores de q em comparação com a gaussiana usual ($q = 1$).

Podemos ver que a q-gaussiana possui simetria similar a gaussiana mas suas caudas podem ser mais curtas ou mais longas. Quando o valor de q é menor do que um, ela é nula em $x = \pm 1/\sqrt{1-q}$. Para q maior do que um sua cauda se torna mais longa do que a gaussiana, indo assintoticamente para zero.

Como uma última observação, perceba que na Eq. (2.30), podemos juntar o termo $\nu D\rho^{\nu-1}$ em um único coeficiente de difusão $D' = \nu D\rho^{\nu-1}$. Nesse caso, o coeficiente de difusão é dependente de ρ e podemos escrever $D' = D'(\rho)$. Essa forma de escrever o coeficiente de difusão será investigada mais profundamente na seção (3.1).

2.4 Teorema-H na mecânica estatística de Tsallis

Apesar dos resultados da seção anterior já indicarem uma conexão entre a forma entrópica de Tsallis e equações de difusão em meios porosos, podemos ir mais longe nessa conexão. Assim como existe uma teorema-H na mecânica estatística usual, existe também uma generalização desse teorema para o contexto de Tsallis. Ou seja, podemos definir uma grandeza A, do tipo energia livre dependente do tempo t, que tende a diminuir com o aumento de t.

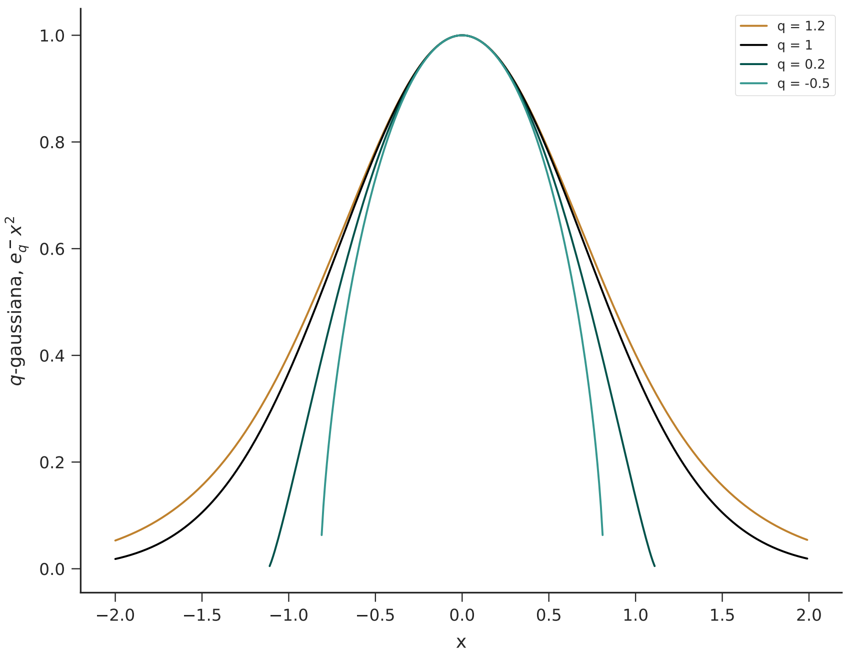

Figura 2.3: Gráfico ilustrando a q-gaussiana para três valores distintos de q em comparação com a gaussiana usual (curva de cor preta).

Dessa forma, supomos que um sistema de densidade $\rho(x,t)$ (a dependência explicita será mantida novamente para deixar claro que o sistema não está no estado estacionário) é descrito por uma equação de difusão tipo meios porosos, como na Eq. (2.32), com $\nu = q$. Como vimos, a dinâmica de $\rho(x,t)$ é ditada pela equação

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(qD\rho(x,t)^{q-1}\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial x} - F(x)\rho\right). \tag{2.39}$$

Além disso, definimos a quantidade A como

$$\begin{aligned} A &= U - TS_q \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\left(V(x)\rho(x,t) - kT\left[\rho(x,t)\left(\frac{1-\rho(x,t)^{q-1}}{q-1}\right)\right]\right)dx. \end{aligned} \tag{2.40}$$

Nessa definição, utilizamos, assim como no caso usual, a energia interna

$$U = \int_{-\infty}^{\infty} V(x)\rho(x,t)dx, \tag{2.41}$$

a entropia de Tsallis (2.1) na forma contínua

$$S_q = k\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x,t)\left(\frac{1-\rho(x,t)^{q-1}}{q-1}\right)dx \tag{2.42}$$

e T deve ser visto como, pelo menos formalmente, um análogo da temperatura usual.

A seguir, investigaremos a derivada temporal de A. Temos, portanto,

$$
\begin{aligned}
\frac{dA}{dt} &= \frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty}\left(V(x)\rho(x,t) - kT\rho(x,t)\left(\frac{1-\rho(x,t)^{q-1}}{q-1}\right)\right)dx && (2.43)\\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial t}\left(V(x)\rho(x,t) - kT\rho(x,t)\left(\frac{1-\rho(x,t)^{q-1}}{q-1}\right)\right)dx && (2.44)\\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial t}\left[V(x) - kT\left(\frac{1-q\rho(x,t)^{q-1}}{q-1}\right)\right]dx. && (2.45)
\end{aligned}
$$

Utilizando a Eq. (2.39), podemos substituir a derivada temporal de $\rho(x,t)$ por uma expressão envolvendo apenas derivadas espaciais, nos levando a

$$
\begin{aligned}
\frac{dA}{dt} &= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial x}\left(qD\rho(x,t)^{q-1}\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial x} - F(x)\rho(x,t)\right)\times\\
&\quad\times\left[V(x) - kT\left(\frac{1-q\rho(x,t)^{q-1}}{q-1}\right)\right]dx. && (2.46)
\end{aligned}
$$

Como próximo passo, realizamos uma integração por partes, conduzindo a

$$
\begin{aligned}
\frac{dA}{dt} &= \left(qD\rho(x,t)^{q-1}\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial x} - F(x)\rho(x,t)\right)\left[V(x) - kT\left(\frac{1-q\rho(x,t)^{q-1}}{q-1}\right)\right]\Bigg|_{-\infty}^{\infty} && (2.47)\\
&- \int_{-\infty}^{\infty}\left(qD\rho(x,t)^{q-1}\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial x} - F(x)\rho(x,t)\right)\left(-F(x) + qkT\frac{\partial\rho(x,t)}{dx}\rho(x,t)^{q-2}\right)dx.
\end{aligned}
$$

Nesse momento, perceba que se $V(x)$ representa um potencial confinante, podemos empregar as condições de contorno $\rho(x,t)\to 0$ e $\partial\rho(x,t)/\partial x\to 0$ quando $x\to\pm\infty$. Consequentemente, o primeiro termo do lado direito da igualdade na Eq. (2.47) deve ser igual a zero independentemente do valor de q. A exemplo do que foi feito no caso da mecânica estatística usual, faremos a identificação $D = kT$ e, assim sendo, podemos reexpressar a derivada temporal de A como

$$
\begin{aligned}
\frac{dA}{dt} &= -\int_{-\infty}^{\infty}\rho(x,t)\left(qD\rho(x,t)^{q-2}\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial x} - F(x)\right)\left(-F(x) + qkT\frac{\partial\rho(x,t)}{dx}\rho(x,t)^{q-2}\right)dx\\
&= -\int_{-\infty}^{\infty}\rho(x,t)\left(qD\rho(x,t)^{q-1}\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial x} - F(x)\rho(x,t)\right)^2 dx \le 0. && (2.48)
\end{aligned}
$$

Portanto, como enunciamos previamente, obtemos que A é uma grandeza do sistema que sempre tende a diminuir. Observe que a desigualdade obtida na Eq. (2.48) se torna igual àquela na Eq. (1.54) quando $q = 1$. É importante enfatizar uma outra importância desse teorema. Ele indica um caráter de irreversibilidade e torna a teoria mais robusta, aumentando o paralelo com a mecânica estatística usual.

2.5 q-álgebra

Para finalizar este capítulo, vamos considerar uma vertente mais formal relacionada a uma álgebra vinculada às funções q-exponencial e q-logaritmo [14, 15].

2.5.1 q-produto

Associado às funções q-exponencial e q-logaritmo, foi proposta uma generalização das operações algébricas [14, 15]. Essa generalização foi inspirada pela não aditividade da entropia S_q. Duas das propriedades que exponenciais e logaritmos têm mas não são válidas para essas generalizações são $e^{x+y} = e^x e^y$ e $\ln(xy) = \ln(x) + \ln(y)$. Dessa forma, queremos definir um produto generalizado $\otimes_q$ entre dois números reais x e y de tal forma que

$$e_q^{x+y} = e_q^x \otimes_q e_q^y. \tag{2.49}$$

Essa operação deve ser dada por

$$x \otimes_q y = [x^{1-q} + y^{1-q} - 1]_+^{\frac{1}{1-q}}. \tag{2.50}$$

A primeira observação que devemos fazer é que essa operação limita os possíveis valores de x e y (a depender do valor de q) pois se $q > 1$, não podemos ter

$$x^{1-q} + y^{1-q} \leq 1. \tag{2.51}$$

Como esperado, esse produto retorna ao caso usual no limite $q \to 1$. É fácil verificar que essa operação também carrega algumas propriedades já conhecidas da usual, a seguir vamos listar algumas delas

(i) **Comutatividade:** $x \otimes_q y = y \otimes_q x$

(ii) **Associatividade:** $(x \otimes_q y) \otimes_q z = x \otimes_q (y \otimes_q z)$

(iii) **Elemento neutro:** $x \otimes_q 1 = x$

(iv) **Aditividade em relação ao q-logaritmo:** $\ln_q(x \otimes y) = \ln_q(x) + \ln_q(y)$.

Esta última propriedade é a que se traduz na aditividade da entropia S_q. Perceba que o produto com 0 depende do valor de x, uma vez que se $q < 1$ e $x > 1$, então $x \otimes 0 = (x^{1-q} - 1)^{1/(1-q)}$. Podemos definir também o produto de um número x repetido n vezes que será denotado por $x^{\otimes_q^n}$ e é dado por

$$x^{\otimes_q^n} = [nx^{1-q} - (n-1)]^{\frac{1}{1-q}} \tag{2.52}$$

Essa generalização do produto é especialmente útil para generalização de outros resultados formais. Por exemplo, é possível utilizá-lo para definir uma transformada de Fourier generalizada, chamada de q-transformada de Fourier, que para uma função $f(x)$ é dada por

$$F_q[f](\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} e_q^{ix\xi} \otimes_q f(x)dx. \tag{2.53}$$

Essa transformada possui a propriedade de transformar uma q-gaussiana em outra q-gaussiana. Essa definição foi utilizada para estabelecer o q-teorema do limite central que generaliza o teorema do limite central redefinindo o conceito de independência de variáveis aleatórias [17, 59, 60].

2.5.2 q-soma

Seguindo a mesma linha de raciocínio feito para o q-produto, podemos definir uma soma generalizada. Nesse caso, o que esperamos é que dados dois reais essa soma, denotada por $\oplus_q$, satisfaça a igualdade

$$e_q^x \oplus_q e_q^y = e_q^{x+y}. \tag{2.54}$$

Dessa forma essa operação é definida como

$$x \oplus_q y = x + y + (1-q)xy. \tag{2.55}$$

A verificação de que esta soma recaia na usual é direta, mais ainda, ela é a soma usual junto a um termo misto. Assim, como o produto, essa soma também preserva algumas propriedades que estão listadas a seguir

(i) **Comutatividade:** $x \oplus_q y = y \oplus_q x$

(ii) **Associatividade:** $(x \oplus_q y) \oplus_q z = x \oplus_q (y \oplus_q z)$

(iii) **Elemento nulo:** $x \oplus_q 0 = x$

(iv) **Aditividade em relação ao q-logaritmo:** $\ln_q(x) \oplus_q \ln_q(y) = \ln_q(xy)$.

A generalização desses conceitos básicos permite diversas outras generalizações como veremos frequentemente neste trabalho. Por exemplo, a q-soma de x com ele mesmo repetido n vezes, que denotamos por $n \odot_q x$, resulta em

$$n \odot_q x = x \oplus x \oplus \cdots \oplus x = nx \left[\sum_{i=0}^{n-2} (1-q)^i x^i \right] + (1-q)^{n-1} x^n \tag{2.56}$$

De certa forma, essa soma representa um produto entre x e n e por isso também é chamada de produto por escalar, entretanto ele é claramente diferente do q-produto.

2.5.3 q-divisão e q-diferença

Para completar o conjunto de operações generalizadas que compõem a q-álgebra, vamos introduzir a q-divisão e a q-diferença. Diferente da soma e produto que foram definidas por meio das propriedades da exponencial e logaritmo, essas surgem como inversa das operações já apresentadas anteriormente. A começar pela q-divisão, como esperado, ela deve ser operação inversa do q-produto. Denotada por $\oslash_q$, ela é dada por

$$x \oslash_q y = [x^{1-q} - y^{1-q} + 1]^{\frac{1}{1-q}}. \tag{2.57}$$

Assim como o q-produto limita o conjunto dos valores de x e y, a operação $\oslash_q$ também limita eles pelo mesmo motivo de divergência, mas nesse caso estamos restritos a relação

$$x^{1-q} - y^{1-q} < -1. \tag{2.58}$$

Desejamos que o inverso de x em relação a $\otimes_q$ seja $1 \oslash_q x$. De fato, como $1 \oslash_q x = (-x^{1-q})^{1/(1-q)}$ verificamos que

$$\begin{aligned} x \otimes_q (1 \oslash_q x) &= x \otimes_q ((2 - x^{1-q})^{\frac{1}{1-q}}) && (2.59)\\ &= (x^{1-q} + (2 - x^{1-q}) - 1)^{\frac{1}{1-q}} && (2.60)\\ &= 1. && (2.61) \end{aligned}$$

Sabemos que para exponenciais e logaritmos usuais valem as relações $e^{x-y} = e^x/e^y$ e $\ln(x/y) = \ln(x) - \ln(y)$. A q-divisão também respeita essas propriedades em relação a q-exponencial e q-logaritmo, ou seja,

$$\begin{cases} e_q^{x-y} = e_q^x \oslash_q e_q^y \\ \ln_q(x \oslash_q y) = \ln_q(x) - \ln_q(y), \end{cases} \tag{2.62}$$

e claramente todos resultados anteriores retornam para o caso usual quando $q \to 1$. Curiosamente a q-divisão permite divisão por 0 pois $x \oslash_q 0 = (x^{1-q} + 1)^{1/(1-q)}$, significando que para $q < 1$, se $x^{1-q} + 1 > 0$, essa divisão existe.

A quarta e última operação generalizada que está englobada na q-álgebra é a q-diferença. Assim como o produto possuí uma operação inversa, a soma possui sua inversa denotada por $\ominus_q$ e definida como

$$x \ominus_q y = \frac{x - y}{1 + (1 - q)y}. \tag{2.63}$$

Para essa operação existir, restringimos os valores de y quando $y = 1/(q-1)$ para eliminar divergências. De forma análoga a q-divisão, temos que $0 \ominus_q x = -x/(1 + (1 - q))x$, que é o inverso de x em relação a q-soma. De fato,

$$\begin{aligned} x \oplus_q (0 \ominus_q x) &= x \oplus_q \left[\frac{-x}{1 + (1 - q)x}\right] && (2.64)\\ &= x - \frac{x}{1 + (1 - q)x}[1 + (1 - q)x] && (2.65)\\ &= 0. && (2.66) \end{aligned}$$

Isso mostra uma grande simetria entre as quatro operações generalizadas acima e as usuais.

Uma interessante aplicação da q-diferença é a construção de uma derivada generalizada. Mas nesse contexto de exponenciais e logaritmos poderíamos nos perguntar qual a maneira mais conveniente de generalizar uma derivada para obter outros resultados. A resposta está no fato da exponencial ser autofunção do operador derivada, ou seja, derivar uma exponencial resulta na própria exponencial. Nesse caso, queremos que a derivada generalizada, denotada por $\mathscr{D}_q$, possua como autofunção a q-exponencial. Para obter isso, empregamos a seguinte definição para uma dada função $f(x)$ diferenciável

$$\begin{aligned}
\mathscr{D}_q f(x_0) &= \lim_{x\to x_0} \frac{f(x)-f(x_0)}{x \ominus_q x_0} && (2.67)\\
&= \lim_{x\to x_0} [1+(1-q)x_0]\frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0} && (2.68)\\
&= [1+(1-q)x_0]\frac{df(x_0)}{dx}. && (2.69)
\end{aligned}$$

Obtemos de forma direta que $\mathscr{D}_1 = d/dx$. Além disso observe que o fator $1+(1-q)x$ pode ser substituido por uma dependência em y na forma y^{1-q}, o que faz a conexão direta com a Eq. (2.25). O limite

$$\begin{aligned}
d_q u &= \lim_{x\to x_0} x \ominus_q x_0 && (2.70)\\
&= \frac{dx}{1+(1-q)x} && (2.71)
\end{aligned}$$

pode ser visto como um diferencial generalizado, por isso podemos ver a derivada $\mathscr{D}_q$ como uma que leva em conta variações não lineares. A derivada generalizada $\mathscr{D}_q$ foi particularmente usada para uma generalização dos operadores da mecânica quântica e da equação de Schroedinger [20–23]. Por exemplo, podemos considerar o operador momento $\hat{p} = -i\hbar\, d/dx$, em que $\hbar$ é constante de Planck, e passar para forma generalizada dependente de q

$$\begin{aligned}
\hat{p} &= -i\hbar\, D_q && (2.72)\\
&= -i\hbar[1+(1-q)x]\frac{d}{dx} && (2.73)
\end{aligned}$$

Esse operador pode ser substituída na equação de Schroedinger para obter

$$-i\hbar D_q\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \qquad (2.74)$$

em que $V(x)$ é o potencial que o sistema quântico está submetido e E é sua energia. No caso do oscilar harmônico quântico, verifica-se que os níveis de energia são dependentes de q, de forma que para $q \neq 1$, a energia é menor do que quando $n = 1$ (para qualquer valor de q) [21].

CAPÍTULO 3

Mecânica estatística generalizada

À primeira vista, o leitor pode ficar confuso sobre o título deste capítulo. Apresentamos no primeiro capítulo a mecânica estatística usual, já conhecida e bem concretizada, e seguimos no capítulo seguinte com uma mecânica estatística não extensiva de Tsallis. Mas esta última já é uma generalização da usual pois quando tomamos o parâmetro $q = 1$, voltamos ao caso anterior, então o capítulo 2 também é uma mecânica estatística generalizada. Mas a partir desse ponto, neste capítulo, estamos interessados em uma generalização ainda mais abrangente da mecânica estatística, uma que engloba inclusive a de Tsallis. Veremos que isso nos permite construir uma formalização unificada de várias entropias e associá-las com a solução estacionária de equações de Fokker-Planck não linear. Nesse contexto mais amplo, introduziremos exponenciais e logaritmos generalizados (novamente incluindo outras generalizações), que permitem ser associados a operações algébricas análogas a q-álgebra.

3.1 Equações de Fokker-Planck generalizadas

Generalizações de logaritmos e exponenciais estão diretamente relacionadas a possíveis formas entropicas e equações do tipo Fokker-Planck. Por exemplo, como visto no capítulo anterior, a q-exponencial e q-logaritmo estão explicitamente ligadas à forma entrópica S_q e, consequentemente, a equações de difusão anômala. A κ-exponencial e o κ-logaritmo propostos por Kanidakis estão associados à κ-entropia, que também é uma generalização monoparamétrica da entropia usual. Outro exemplo também inclui uma generalização de dois parâmetros que é inspirada por propriedades de operações algébricas e também fornece um formalismo de forma entrópica com dois parâmetros [42]. Vamos então tratar de uma equação de difusão generalizada.

Uma das equações mais utilizadas para descrever aspectos dinâmicos de um sistema é a equação de difusão. Para englobar casos em que a difusão não é a usual, precisamos generalizar a equação. Queremos fazer isso de forma bastante geral. Dessa maneira, podemos considerar a seguinte equação de difusão

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial \rho}{\partial x}\right) - \frac{\partial\left(F\phi\right)}{\partial x}, \tag{3.1}$$

em que ρ é uma densidade dependente de x e t, D é um coeficiente de difusão que pode depender de ρ e x, F faz o papel de uma força externa e ϕ é uma função que depende de ρ. No caso linear, o que temos é que $D = D(x)$ e $\phi(\rho) = \rho$. Mais particular ainda, no caso usual, $D = D_0$ é constante, retornando para Eq. (1.45). Na verdade, em geral, consideramos

$$F\phi \to F\rho, \tag{3.2}$$

o que deixa toda a origem do comportamento anômalo no coeficiente D. Quando ρ é uma densidade de probabilidade, a Eq. (3.1) pode ser pensada como uma espécie de equação de Fokker-Planck. Mais ainda, se D depende de ρ explicitamente, ela é não linear.

Essa equação de difusão deve possuir uma solução no equilíbrio quando F independe de t e é confinante. Para investigar isso, vamos tomar ρ independente de t. Nesse caso, a equação de difusão se torna

$$\frac{d}{dx}\left(D\frac{d\rho}{dx} - F\phi\right) = 0, \tag{3.3}$$

que, por sua vez, pode ser reescrita como

$$D\frac{d\rho}{dx} - F\phi = c, \tag{3.4}$$

em que c é uma constante. Como o aspecto confinante de F conduz à a densidade ρ localizado, podemos empregar as condições de contorno $\rho \to 0$ e $d\rho/dx \to 0$ quando $x \to \pm\infty$, de forma que $c = 0$, e a equação anterior se torna

$$D\frac{d\rho}{dx} = F\phi. \tag{3.5}$$

Perceba que dado uma solução estacionária da Eq. (3.5) existe uma família de equaçõs de Fokker-Planck associadas, tais como a Eq. (3.1), quando D/ϕ e F são mantidos fixados. Um caso particular que podemos considerar é quando $D = D(\rho)$ e $\phi = \phi(\rho)$. Tomando $\rho(0) = \rho_0$, a integração dessa equação estacionária nos leva a

$$Ln(\rho) = Ln(\rho_0) - \frac{V(x)}{D_0}, \tag{3.6}$$

em que foi empregado a definição

$$V(x) = -\int_0^x F(x')dx' \tag{3.7}$$

e

$$Ln(x) = \int_1^x \frac{dy}{g(y)}, \tag{3.8}$$

em que $g(y) = D_0\phi(y)/D(y)$ e D_0 é constante. A função $Ln(x)$ é chamada logaritmo generalizado e sua inversa, denotada por $E(x)$, exponencial generalizada [61]. Note que, como dito no início deste capítulo, a origem da exponencial e logaritmo generalizados estão diretamente ligadas a equações de Fokker-Planck. Em geral, existem duas propriedades que caracterizam essas funções como exponencial e logaritmo:

(i) $E(0) = 1$ e $Ln(1) = 0$,

(ii) $E(x)$ e $Ln(x)$ são monotonicamente crescentes.

Utilizando a inversa de $Ln(x)$, podemos escrever a solução estacionária dada na Eq. (3.6) como

$$\rho(x) = E\left(Ln(\rho_0) - \frac{V(x)}{D_0}\right), \tag{3.9}$$

Em particular, se a razão $D(\rho)/\phi(\rho)$ for igual a uma constante D_0, reduzimos para o caso usual

$$\rho(x) = \rho_0\, e^{-\frac{V(x)}{D_0}} \tag{3.10}$$

que foi o resultado obtido para solução estacionária na difusão usual (1.43).

3.2 Formas entrópicas generalizadas

Vamos passar para outro importante aspecto da mecânica estatística que é a entropia. Iniciamos propondo uma forma entrópica que dá o mesmo peso para diferentes estados. Isso é obtido considerando a função $r = r(\rho)$ que pode ser empregada para definir uma entropia da seguinte forma

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} r(\rho) dx. \tag{3.11}$$

Apesar de termos usado o intervalo de integração como toda reta, na verdade ele é dado pelo domínio de x, a notação acima é apenas por simplicidade. Vamos maximizar essa entropia considerando o vínculo da probabilidade

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)\, dx = 1 \tag{3.12}$$

e uma generalização das médias da energia, caracterizada por uma função $\psi(\rho)$, que é descrita pela integral

$$U = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{V}(x)\psi(\rho)\, dx. \tag{3.13}$$

Mais uma vez, iremos utilizar o método dos multiplicadores de Lagrange para fazer essa extremização. Prosseguimos definindo a seguinte função auxiliar

$$\mathscr{F} = S + \beta\left(U - \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{V}(x)\psi(\rho)\, dx\right) + \lambda\left(1 - \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)\, dx\right), \tag{3.14}$$

em que β e λ são multiplicadores de Lagrange. A solução de equilíbrio ocorre quando tomamos a derivada do funcional $\mathscr{F}$ igual a zero, resultando em

$$\frac{dr}{d\rho} - \beta\tilde{V}\frac{d\psi}{d\rho} - \lambda = 0. \tag{3.15}$$

Portanto, ao resolver essa equação para ρ, obtemos a solução para os estados de equilíbrio do sistema investigado. Um caso particular dessa equação é quando temos

$$r(\rho) = -\rho\ln(\rho) \tag{3.16}$$

que ao ser substituída na Eq. (3.11) fornece a forma entrópica de Boltzmann-Gibbs e verificamos (com $\psi(\rho) = \rho$ e $\tilde{V} = V$) que

$$\rho \propto e^{-\beta V}. \tag{3.17}$$

Assim como feito no capítulo 1 para equação de Fokker-Planck linear e a entropia de Boltzmann-Gibbs, podemos fazer uma conexão entre a forma entrópica generalizada e a equação de Fokker-Planck generalizada. Uma possível maneira de proceder nessa direção é supor que a solução de ρ é a mesma para as Eqs. (3.5) e (3.15). Por conseguinte, também consideramos que o coeficiente de difusão é separável na forma $D = D_1(\rho)D_2(x)$. Logo, a Eq. (3.5) pode ser escrita como

$$\frac{D_1(\rho)}{\phi(\rho)}\frac{d\rho}{dx} = -\frac{1}{D_2(x)}\frac{dV}{dx}. \tag{3.18}$$

Por outro lado, derivando a Eq. (3.15) em relação a x, obtemos

$$\frac{1}{\beta}\frac{d}{d\rho}\left(\frac{\lambda - dr/d\rho}{d\psi/d\rho}\right)\frac{d\rho}{dx} = -\frac{d\tilde{V}}{dx}. \tag{3.19}$$

Comparando as Eqs. (3.18) e (3.19), temos as igualdades

$$\frac{1}{\beta}\frac{d}{d\rho}\left(\frac{\lambda - dr/d\rho}{d\psi/d\rho}\right) = \xi\frac{D_1(\rho)}{\phi(\rho)} \tag{3.20}$$

$$\frac{d\tilde{V}}{dx} = \frac{\xi}{D_2(x)}\frac{dV}{dx}, \tag{3.21}$$

em que ξ é uma constante arbitrária. Essas equações mostram que a principal característica da forma entrópica está na parte dependente de ρ no coeficiente de difusão e em ψ, enquanto o potencial é modificado pela dependência em x do coeficiente de difusão. Em geral, o parâmetro λ não é eliminado. Contudo, se for considerado o caso particular em que $\psi(\rho) = \rho$ (média usual), a dependência em λ desaparece e a Eq.(3.20) se reduz a

$$-\frac{1}{\beta}\frac{d^2r}{d\rho^2} = \xi\frac{D_1(\rho)}{\phi(\rho)}. \tag{3.22}$$

Além disso, podemos tomar $\xi = 1$ e considerar o caso em que o coeficiente de difusão depende apenas de ρ, ou seja, $D = D_1(\rho)$. Dessa forma, a relação entre o coeficiente de difusão e a forma entrópica é

$$\frac{D}{\phi} = -\frac{1}{\beta}\frac{d^2r}{d\rho^2}, \tag{3.23}$$

Essa equação mostra que existe uma família de equações de Fokker-Planck, caracterizadas por ϕ e pelo coeficiente de difusão D, que corresponde a uma mesma forma entrópica caracterizada por $r(\rho)$. Por outro lado, como dito no início desta seção, supor $\phi(\rho) = \rho$ deixa toda caracterização da equação de Fokker-Planck no coeficiente de difusão D e torna a correspondência entre o coeficiente de difusão e a função $r(\rho)$ um a um quando aplicamos dois vínculos na entropia. A Eq. (3.23) será utilizada como um importante passo para encontrar a forma entrópica associada ao sistema via a sua distribuição ou, reciprocamente, encontrar a distribuição associada a um determinado sistema por meio de sua entropia. Essa é a ponte entre as equações de Fokker-Planck e as formas entrópicas.

Como uma primeira ilustração desse resultado, vamos tomar a forma entrópica de Boltzmann-Gibbs, caracterizada por $r(\rho) = -\rho \ln(\rho)$. Como a segunda derivada dessa função em relação a ρ é dada por

$$\frac{d^2 r}{d\rho^2} = -\frac{1}{\rho}. \tag{3.24}$$

podemos substituir na Eq. (3.23) para obter

$$D = \frac{1}{\beta}. \tag{3.25}$$

Como esperado, encontramos a relação de Einstein que afirma que em um processo difusivo de várias partículas, tipo movimento browniano, o coeficiente de difusão deve ser proporcional à temperatura do sistema no equilíbrio térmico. Agora que a conexão entre formas entrópicas e equações de Fokker-Planck foi feita, exponenciais e logaritmos também estão conectadas à entropia. Isso significa que esses três aspectos estão ligados. Do ponto de vista fenomenológico, as exponenciais podem estar relacionadas a distribuições, o que reforça o fato de que a distribuição associada nos permite obter uma equação de Fokker-Planck correspondente e a entropia.

É importante fazer observações sobre aspectos que caracterizam a entropia. O primeiro que ressaltamos é a não unicidade da forma entrópica S. Isso é identificado via a Eq. (3.15), pois ao adicionarmos um termo proporcional a ρ em $r(\rho)$, ele se torna constante e, portanto, irrelevante ao ser incorporado no multiplicador de Lagrange λ. Também em muitos casos o sistema possui um numero finito de estados (e consequentemente discreto), que leva a entropia a ser escrita na forma

$$S = \sum_{i=1}^{W} r(p_i), \tag{3.26}$$

em que W é o número de estados e p_i é a probabilidade do i-ésimo estado. Esperamos também que a $r(p_i)$ respeite as seguinte relações matemáticas:

(i) **(Expansibilidade)** $r(0) = 0$,

(ii) **(Estado único)** $r(1) = 0$,

(iii) **(Convexidade)** $\frac{d^2 r}{dp_i^2} < 0$.

A propriedade (i) afirma que se adicionarmos um estado de probabilidade nula a um sistema, a entropia não é alterada. A propriedade (ii) afirma que se um sistema possui um único estado acessível, ou seja, a probabilidade do sistema estar nesse estado é 1, então a entropia do sistema é nula. E, por último, a propriedade (iii) afirma que a entropia deve ser convexa. Todas essas propriedades estão presentes na entropia de Boltzmann-Gibbs e de Tsallis . Essa última propriedade também mostra, como consequência com a Eq. (3.23), que o coeficiente de difusão deve ser positivo considerando que $\beta > 0$.

3.3 Derivadas generalizadas

Outro ponto que podemos ressaltar é em relação a derivadas. Vimos no capítulo anterior que podemos associar a q-exponencial a uma derivada generalizada. Da mesma forma, podemos vincular uma derivada generalizada à exponencial $E(x)$. Iremos denotar essa derivada por $\mathscr{D}$ e definida de tal forma que $E(x)$ é uma auto função dessa derivada, ou seja, empregamos

$$\mathscr{D}E(x) = E(x), \tag{3.27}$$

assim como foi feito para q-exponencial. Nesse contexto, o operador pode possuir uma forma abrangente, entretanto, um candidato compreensível para defini-lo é um operador que é produto da derivada usual com uma função $f(x,y)$ (a ser determinada a depender da exponencial associada), em que y é uma função de x (a mesma forma que a q-derivada respeita). Com isso, consideramos derivadas generalizadas de y definidas como

$$\mathscr{D}y = f(x,y)\frac{dy}{dx}. \tag{3.28}$$

Perceba que essa derivada possui uma analogia direta com a equação estacionária de Fokker-Planck dada em (3.5) quando $\phi = \rho$, pois pela construção devemos ter que a exponencial associada deve ser solução da equação diferencial

$$f(x,y)\frac{dy}{dx} = y \qquad\qquad y(0) = 1 \tag{3.29}$$

e podemos identificar a função $f(x,y)$ com D/F. Se a função $f(x,y)$ depende apenas de x, a derivada se torna linear, ao contrário do caso em que ela depende de y. No caso em que ela não depende nem x e nem de y, podemos escrever $f(x,y) = c$, em que c é uma constante. Nesse caso, a derivada é a usual com auto função (exponencial associada) $E(x) = e^{cx}$. A seguir, vamos supor que $f(x,y)$ não é constante. Um primeiro caso a se considerar é quando f pode ser escrito como $f(x,y) = 1/h(x)$. Substituindo essa função na Eq. (3.29), obtemos

$$\frac{1}{y}\frac{dy}{dx} = h(x), \tag{3.30}$$

que ao resolver nos conduz a solução

$$y = \exp\left(\int_0^x h(x')dx'\right) \tag{3.31}$$

em que y uma é exponencial generalizada se $h(x) > 0$ e sua inversa é um logaritmo generalizado. É interessante observar que a Eq. (3.31) pode ser vista como outra definição abrangente de exponencial generalizada. Uma segunda possibilidade para $f(x,y)$ é empregar uma função separável das variáveis x e y, ou seja, escrevê-la como

$$f(x,y) = \frac{1}{h(x)g(y)}, \tag{3.32}$$

que nesse caso nos leva a equação integral

$$\int_1^y \frac{dy'}{g(y')} = \int_0^x h(x')dx'. \tag{3.33}$$

Retornando na Eq. (3.29), vamos supor que ela possui uma solução inversível, ou seja, é possível escrever tanto $y = y(x)$ quanto $x = x(y)$. Dessa forma, a função $f(x,y)$ pode ser reescrita, por exemplo, como

$$f(x,y) = f(x, y(x)) \tag{3.34}$$

ou

$$f(x,y) = f(x(y), y). \tag{3.35}$$

Na Eq. (3.34), foi colocado a dependência explicita de x, e na Eq. (3.35), foi usado a dependência explicita de y. No primeiro caso é interessante observar que foi feito uma passagem de um operador que é possivelmente não linear e no segundo foi considerado o inverso.

Adicionalmente, para o caso linear em que $f(x,y) = 1/h(x)$ (dependência em x), podemos identificar quem é a função $h(x)$ caso $E(x)$ seja conhecido. Para isso, a Eq. (3.29) conduz a

$$\frac{1}{h(x)} E'(x) = E(x) \tag{3.36}$$

e, portanto, é obtido que $h(x)$ é dado pela razão $E'(x)/E(x)$, o que nos permite escrever

$$\mathscr{D}y = \frac{E(x)}{E'(x)} \frac{dy}{dx} \tag{3.37}$$

que é uma derivada generalizada escrita de forma explicita. É fácil observar que no caso mais simples da exponencial usual retornamos a derivada usual, uma vez que $e^x/(e^x)' = 1$.

3.4 Teorema-H generalizado

Tendo exposto generalizações de equações de Fokker-Planck e de formas entrópicas, verificamos que essas são consistentes com a mecânica estatística usual e de Tsallis. Entretanto, um forte aspecto demonstrado para essas mecânicas estatísticas é a existência de um teorema-H. Na seção 1.5, esse teorema foi verificado para a forma entrópica de Boltzmann-Gibbs e, na seção 2.4, foi visto o mesmo em uma generalização para forma entrópica de Tsallis. Para que essa vertente abrangente que estamos apresentando neste capítulo seja mais robusta, é conveniente investigar a existência de um teorema-H para a forma entrópica introduzida na Eq. (3.11). É isso que iremos apresentar nesta seção. Mostraremos que mesmo em um contexto tão abrangente quanto este, é possível definir uma gradeza em um sistema fora do equilíbrio que sempre tende a diminuir. Para fazer isso, vamos considerar que um sistema representado pela densidade $\rho(x,t)$ tenha dinâmica ditada pela Eq. (3.1), que iremos reescrever como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial \rho}{\partial x} - F(x)\rho \right). \tag{3.38}$$

Assim como nos casos apresentados anteriormente, queremos definir uma quantidade A do tipo energia livre que diminui ao longo do tempo. Dessa forma, esse A será, novamente, definido como $A = U - S/\beta$, mas S deve ser a forma entrópica da Eq. (3.11), ou seja,

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} \left(V(x)\rho - \frac{1}{\beta} r(\rho) \right) dx. \tag{3.39}$$

Realizando uma derivada temporal em A, obtemos

$$
\begin{aligned}
\frac{dA}{dt} &= \frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty}\left(V(x)\rho - \frac{1}{\beta}r(\rho)\right)dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial t}\left(V(x)\rho - \frac{1}{\beta}r(\rho)\right)dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial \rho}{\partial t}\left(V(x) - \frac{1}{\beta}\frac{dr(\rho)}{d\rho}\right)dx.
\end{aligned}
\tag{3.40}
$$

Utilizando a Eq. (3.38) para substituir a derivada de ρ em relação a t, temos que

$$
\frac{dA}{dt} = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial \rho}{\partial x} - F\rho\right)\left(V(x) - \frac{1}{\beta}\frac{dr(\rho)}{d\rho}\right)dx. \tag{3.41}
$$

Via uma integração por partes, obtemos

$$
\begin{aligned}
\frac{dA}{dt} &= \left(D\frac{\partial \rho}{\partial x} - F(x)\rho\right)\left(V(x) - \frac{1}{\beta}\frac{dr(\rho)}{d\rho}\right)\Bigg|_{-\infty}^{\infty} \\
&\quad - \int_{-\infty}^{\infty}\rho\left(\frac{D}{\rho}\frac{\partial \rho}{\partial x} - F(x)\right)\left(-F(x) - \frac{1}{\beta}\frac{\partial \rho}{\partial x}\frac{d^2 r}{d\rho^2}\right)dx.
\end{aligned}
\tag{3.42}
$$

Fazendo a suposição que $\rho(x,t)$ representa um estado localizado, temos que $\rho = 0$ e $d\rho/dx = 0$ em $x \to \pm\infty$, conduzindo o primeiro termo do lado direito da igualdade a ser igual a zero. Por outro lado, podemos fazer a identificação $D/\rho = -(1/\beta)d^2r/d^2\rho$, por meio da Eq. (3.23) para concluir que

$$
\frac{dA}{dt} = -\int_{-\infty}^{\infty}\rho\left(\frac{D}{\rho}\frac{\partial \rho}{\partial x} - F(x)\right)^2 dx \leq 0. \tag{3.43}
$$

Portanto, A sempre diminui ao longo do tempo. Esse teorema mostra que qualquer estatística englobada nessa generalização possui um teorema-H associado e, consequentemente, uma propriedade de irreversibilidade. Particularmente, podemos reobter o caso de Tsallis, substituindo a forma entrópica de Tsallis.

3.5 Exemplos de distribuições

Até esse ponto, nosso estudo foi fortemente baseado na possibilidade do sistema sendo investigado poder ser descrito por uma distribuição $\rho(x)$, particularmente, aquela dada pela solução estacionária da equação de Fokker-Planck (3.5). Supondo que seja dada essa distribuição, podemos fazer a identificação com a forma da Eq. (3.9) para obter o tipo de exponencial que descreve o sistema, assim como a constante $Ln(\rho_0)$ e o potencial externo $V(x)$. Tendo essa informação, a derivada generalizada correspondente a exponencial pode ser obtida por meio da Eq. (3.29), enquanto a Eq. de Fokker-Planck estacionária (Eq. (3.5)) nos fornece o coeficiente de difusão do sistema. Feito esses passos, podemos escrever qual a equação de Fokker-Planck generalizada associada a dinâmica da distribuição de probabilidade via a Eq. (3.1). E para finalizar, a forma entrópica do sistema pode ser obtida pela Eq. (3.23).

De forma resumida, com nosso desenvolvimento, podemos obter duas importantes informações da dinâmica estatística de um sistema apenas através da sua distribuição de probabilidade estacionária: a sua equação de Fokker-Planck e a forma entrópica. O caminho inverso também pode ser feito, ou seja, se temos a forma entrópica, a Eq. (3.23) nos fornece o coeficiente de difusão, que por sua vez fornece a equação de Fokker-Planck estacionária, e, por fim, resulta na distribuição estacionária do sistema. Com isso em mente, nesta seção, apresentaremos alguns exemplos de distribuições com exponenciais generalizadas que permitem traçar o caminho descrito acima.

3.5.1 Estatística de Tsallis

O primeiro exemplo que levaremos em conta será dada pela q-exponencial, que é uma das principais inspirações para todo desenvolvimento feito neste capítulo. Vimos no capítulo 2 diversos resultado acerca da estatística de Tsallis, da q-exponencial e q-logaritmo que devem ser reobtidos com nosso desenvolvimento. Normalmente, somos introduzidos primeiro à entropia de Tsallis para então obter os resultados conseguintes. Aqui, vamos iniciar pela distribuição e culminar na entropia. Nesse contexto, partimos de

$$\begin{aligned} \rho(x) &= \exp_q\left(c - \frac{V(x)}{D_0}\right) \qquad (3.44) \\ &= \left[1 + (1-q)\left(c - \frac{V(x)}{D_0}\right)\right]^{\frac{1}{1-q}}, \end{aligned}$$

em que $V(x)$ é o potencial relativo ao sistema e $c = \ln_q(\rho_0)$, de acordo com a Eq. (3.9). Com essa distribuição queremos obter a equação de Fokker-Planck. Aplicando a Eq. (3.5) com esse ρ, tomando $\phi = \rho$ e $F = -dV(x)/dx$, temos que o coeficiente de difusão é dado por

$$D = D_0 \rho^{1-q}. \qquad (3.45)$$

No caso particular em que $q = 1$, o coeficiente de difusão se torna constante igual a D_0, que é o resultado esperado quando retornamos no caso usual. Esse coeficiente de difusão nos permite escrever uma primeira forma da Equação de Fokker-Planck utilizando a Eq. (3.1) como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D_0 \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho^{1-q}\frac{\partial \rho}{\partial x}\right) - \frac{\partial (F\rho)}{\partial x}, \qquad (3.46)$$

que é uma forma não linear da EFP. Dessa forma, reobtemos a equação aplicada para difusão anômala em meios porosos apresentada na seção (2.4).

Podemos obter também uma forma linear dessa equação fazendo a substituição de ρ para sua dependência em x no coeficiente de difusão, que fica

$$D = D_0 \left[1 + (1-q)\left(c - V(x)/D_0\right)\right]. \qquad (3.47)$$

Isso nos conduz a equação de Fokker-Planck linear

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D_0 \frac{\partial}{\partial x}\left(\left[1 + (1-q)\left(c - \frac{V(x)}{D_0}\right)\right]\frac{\partial \rho}{\partial x}\right) - \frac{\partial (F\rho)}{\partial x}. \qquad (3.48)$$

Por último, podemos obter uma forma não linear mais geral escrevendo $\rho = \rho^{1-l}\rho^{l}$, e fazendo uma substituição parcial de ρ pela sua dependência parcial na variável x em um dos termos do produto, por exemplo, em ρ^{1-q}. Esse procedimento nos fornece

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D_0 \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho^{(1-q)l}\left[1+(1-q)\left(c-\frac{V(x)}{D_0}\right)\right]^{1-l}\frac{\partial \rho}{\partial x}\right) - \frac{\partial\left(F\rho\right)}{\partial x}, \tag{3.49}$$

que retorna a Eq. (3.46) quando $l = 1$ e a Eq. (3.48) quando $l = 0$. Como o potencial $V(x)$ é genérico, podemos fazer escolhas particulares para ele. Uma bastante simples seria considerar o potencial de força constante, $V(x) = bx$, que corresponde a distribuição $\rho(x) = e_q^{c-bx/D_0}$. Nesse caso, a equação de Fokker-Planck linear correspondente é dada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D_0 \frac{\partial}{\partial x}\left(\left[1+(1-q)\left(c-\frac{bx}{D_0}\right)\right]\frac{\partial \rho}{\partial x}\right) + b\frac{\partial \rho}{\partial x}. \tag{3.50}$$

Uma outra possibilidade é considerar um potencial harmônico $V(x) = \gamma x^2/2$ (correspondendo a $F(x) = -\gamma x$), que leva à distribuição q-gaussiana $\rho(x) = e_q^{c-\gamma x^2/2D_0}$, cuja equação de Fokker-Planck é

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D_0\left[1+(1-q)\left(c-\frac{\gamma x^2}{2D_0}\right)\right]\frac{\partial \rho}{\partial x}\right) + \frac{\partial\left(\gamma x \phi\right)}{\partial x}. \tag{3.51}$$

Perceba, entretanto, que a dependência em ρ do coeficiente de difusão nos dois casos anteriores são iguais a $D_0\rho^{1-q}$. A q-gaussiana também foi identificado como uma solução estacionária para redes óticas [12, 62, 63]. Dessa forma, deve ser possível conectar a Eq. (3.51) com o resultado obtido para redes ópticas. Para fazer isso, segue que a equação estacionária que corresponde a Eq. (3.51), via a Eq. (3.5), é

$$D_0\rho^{1-q}\frac{d\rho}{dx} = -\gamma x \rho. \tag{3.52}$$

Essa equação pode ser dividida em ambos lados por $[1-(1-q)\gamma x^2/2D_0]$ e, então, reescrita como

$$\left[D_0 + \frac{D_0(1-q)\ln_q(\rho_0)}{1+(q-1)\gamma x^2/2D_0}\right]\frac{d\rho}{dx} = \frac{-\gamma x}{1+(q-1)\gamma x^2/2D_0}\rho. \tag{3.53}$$

Perceba que essa última equação mantém a mesma estrutura da Eq. (3.5), mas podemos identificar novos coeficientes de difusão e força modificados. Denotando eles por $\tilde{D}$ e $\tilde{F}$, respectivamente, podemos escrever

$$\tilde{D}\frac{d\rho}{dx} = \tilde{F}\rho \tag{3.54}$$

com

$$\tilde{D} = D_0 + \frac{D_0(1-q)\ln_q(\rho_0)}{1+(q-1)\gamma x^2/2D_0} \qquad \text{e} \qquad \tilde{F} = \frac{-\gamma x}{1+(q-1)\gamma x^2/2D_0}. \tag{3.55}$$

Isso significa que dois sistemas com coeficientes de difusão e força diferentes podem ter soluções estacionárias iguais desde que a razão D/F seja igual. Entretanto, suas equações de Fokker-Plank (dependentes do tempo) serão diferentes. A equação (3.55) faz a identificação com o resultado obtido na Ref. [12], que queríamos reproduzir após ajustar as constantes e mudar a variável x para uma variável de momento p.

Para finalizar esse exemplo, vamos investigar a forma entrópica associada à distribuição ρ. Como descrito no início do capítulo, isso pode ser feito utilizando o coeficiente de difusão (Eq. (3.45) aplicada a Eq. (3.23)) com $\phi = \rho$

$$\frac{d^2 r}{d\rho^2} = -\beta D_0 \rho^{-q}. \tag{3.56}$$

Essa equação pode ser resolvida usando as condições $r(0) = 0$ e $r(1) = 0$, que nos leva a

$$r(\rho) = \frac{\beta\rho}{2-q}\left(\frac{\rho^{1-q}-1}{q-1}\right). \tag{3.57}$$

A substituição desse $r(\rho)$ na Eq. (3.11), excluindo a constante multiplicativa $[\beta/(2-q)]$, nos conduz a forma entrópica

$$S_q = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho - \rho^{2-q}}{q-1} dx, \tag{3.58}$$

que corresponde à entropia de Tsallis.

Esse desenvolvimento mostra que os resultados obtidos nas seções anteriores e o desenvolvimento descrito é consistente com os resultados esperados para entropia de Tsallis e com resultados acerca da distribuição do tipo q-exponencial (por exemplo a q-gaussiana) e suas equações de Fokker-Planck.

3.5.2 Estatística de Kaniadakis

Como explicado brevemente antes, outras propostas de estatísticas generalizadas foram realizadas além da de Tsallis. Um dos exemplos é a de Kaniadakis que também construiu sua teoria direcionada a sistemas que não são lineares. Por isso, moveremos nossa discussão para o contexto de Kaniadakis [36, 64]. Nessa linha de raciocínio, precisamos introduzir uma nova exponencial generalizada conhecida como κ-exponencial. Ela é definida como

$$e^x_{\{\kappa\}} = \left(\sqrt{1+\kappa^2 x^2} + \kappa x\right)^{\frac{1}{\kappa}} \tag{3.59}$$

e sua inversa é uma generalização do logaritmo chamado κ-logaritmo, que é dada por

$$\ln_{\{\kappa\}}(x) = \frac{x^\kappa - x^{-\kappa}}{2\kappa}. \tag{3.60}$$

Ambas as funções acima retornam para o caso usual quando $\kappa = 0$. Por exemplo, usando a regra de l'Hôpital, verificamos que

$$\begin{aligned} \lim_{\kappa\to 0} \ln_{\{\kappa\}}(x) &= \lim_{\kappa\to 0} \frac{\frac{d}{d\kappa}(x^\kappa - x^{-\kappa})}{\frac{d}{d\kappa}(2\kappa)} \\ &= \ln(x). \end{aligned} \tag{3.61}$$

No desenvolvimento que segue, visando ilustrar de diferentes maneiras nossos desenvolvimentos, vamos tomar o caminho inverso do caso de Tsallis. Ao invés de iniciar introduzindo uma distribuição generalizada, aqui vamos começar pela entropia generalizada para culminar nas distribuições que devem corresponder a κ-exponencial e suas equações de Fokker-Planck. Nesse sentido, a forma entrópica descrita por

$$S_\kappa = -\frac{1}{2\kappa}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\rho^{1+\kappa}}{1+\kappa} - \frac{\rho^{1-\kappa}}{1-\kappa}\right) dx \tag{3.62}$$

é conhecida como κ-entropia e retoma a entropia de Boltzmann-Gibbs quando $\kappa = 0$ [36]. Portanto, a função $r(\rho)$ que está associado a κ-entropia é

$$r(\rho) = -\frac{1}{2\kappa}\left(\frac{\rho^{1+\kappa}}{1+\kappa} - \frac{\rho^{1-\kappa}}{1-\kappa}\right). \tag{3.63}$$

Tendo essa função, podemos calcular sua derivada segunda em relação a ρ para aplicar diretamente na Eq. (3.23) e encontrar o coeficiente de difusão. Esse cálculo nos leva a

$$\frac{D}{\phi} = \frac{1}{2\beta}\left(\rho^{\kappa-1} + \rho^{-\kappa-1}\right). \tag{3.64}$$

Esse último resultado unido com a Eq. (3.5) fornece a equação diferencial

$$\frac{1}{2\beta}\left(\rho^{\kappa-1} + \rho^{-\kappa-1}\right)\frac{d\rho}{dx} = F, \tag{3.65}$$

que, por sua vez, nos conduz à solução

$$\rho(x) = e_{\{\kappa\}}^{c-\beta V(x)}, \tag{3.66}$$

em que novamente foi empregado o potencial $V(x) = -\int_0^x F(x')dx'$ e c é uma constante. Essa solução é exatamente aquela dada na Eq. (3.9) de forma que $c = \ln_{\{\kappa\}}(\rho_0)$ e $D_0 = \beta^{-1}$. Substituindo ϕ por ρ na Eq. (3.64), podemos encontrar a equação de Fokker-Planck não linear associada à κ-entropia

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \frac{1}{2\beta}\frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\rho^{\kappa} + \rho^{-\kappa}\right)\frac{\partial\rho}{\partial x}\right] - \frac{\partial\left(F\phi\right)}{\partial x}. \tag{3.67}$$

Por procedimento análogo ao da subseção anterior, a forma linear segue diretamente, obtendo

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \frac{1}{2\beta}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\left[\sqrt{1+\kappa^2(c-\beta V(x))^2} + \kappa(c-\beta V(x))\right]^2 + 1}{\sqrt{1+\kappa^2(c-\beta V(x))^2} + \kappa(c-\beta V(x))}\frac{\partial\rho}{\partial x}\right) - \frac{\partial\left(F\phi\right)}{\partial x}. \tag{3.68}$$

E por último, a interpolação entre ρ e x através da fatoração $\rho = \rho^{1-a}\rho^a$, com substituição parcial de ρ por sua dependência em ρ, nos leva à forma não linear da equação de Fokker-Planck cujo coeficiente de difusão é escrito como

$$\begin{aligned} D &= \frac{1}{2\beta}\left(\rho^{-\kappa(a-1)}\left[\sqrt{1+\kappa^2(c-\beta V(x))^2} + \kappa(c-\beta V(x))\right]^a\right. \\ &+ \left.\rho^{-\kappa(a-1)}\left[\sqrt{1+\kappa^2(c-\beta V(x))^2} + \kappa(c-\beta V(x))\right]^a\right), \end{aligned} \tag{3.69}$$

em que mais uma vez recuperamos a Eq. (3.67) (Eq. (3.68)) quando $a = 0$ ($a = 1$).

Assim como no desenvolvimento de Tsallis não foi necessário explicitar a forma de $V(x)$ para obter os resultados desejados, no contexto de Kaniadakis também não foi necessário. Portanto, podemos escolher um potencial específico para aplicar a forma entrópica e as equações de Fokker-Planck que foram obtidas.

3.5.3 Exponencial alongada

Em 1998 foi proposto uma forma entrópica que tem como distribuição de máxima entropia uma exponencial alongada [65]. Vamos considerar essa função como último exemplo para nosso desenvolvimento. Portanto, a exponencial generalizada, aqui, é definida como

$$E_a^x = e^{x^a}, \tag{3.70}$$

cuja inversa é

$$Ln_a(x) = (\ln(x))^{1/a}. \tag{3.71}$$

em que a é o parâmetro que caracteriza essa exponencial e retorna à exponencial e ao logaritmo usuais quando $a = 1$. Seguindo passos análogos aos feitos para o caso de Tsallis, iremos iniciar supondo que a distribuição de probabilidade do sistema analisado é conhecida, e é dada por uma exponencial alongada. Nesse contexto, a normalização sugere que ela deve ser descrita por

$$\rho(x) = \frac{ac^{1/a}}{\Gamma(1/a)}\, e^{-cx^a}, \tag{3.72}$$

em que x é positivo e $\Gamma(z)$ é a função gama, definida como

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1}e^{-t}dt. \tag{3.73}$$

O próximo passo é identificar essa distribuição com a estrutura dada na Eq. (3.9). Isso sugere que $V(x)/D_0 = c^{1/a}x$, que corresponde a uma força constante $F(x) = -D_0c^{1/a}$. Como ρ é estacionário no tempo, ela pode ser aplicada na Eq. (3.5) em conjunto com a força F obtido para encontrar o coeficiente de difusão D. Através disso, verificamos que

$$D = D_0\frac{(-\ln\rho)^{\frac{1-a}{a}}}{a}. \tag{3.74}$$

Esse coeficiente de difusão dependente de ρ nos conduz à equação de Fokker-Planck não linear

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = D_0\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{(-\ln(\rho))^{\frac{1-a}{a}}}{a}\frac{\partial\rho}{\partial x}\right) - \frac{\partial\,(F\rho)}{\partial x} \tag{3.75}$$

e, portanto, proporciona uma solução estacionária do tipo exponencial alongada. Assim como feito nas duas seções anteriores, a vertente linear pode ser obtida pela substituição de ρ por x no coeficiente de difusão. Nesse caso, ficamos com $D = D_0x^{1-a}/a$, e a equação de Fokker-Planck linear correspondente é

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = D_0\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{x^{1-a}}{a}\frac{\partial\rho}{\partial x}\right) - \frac{\partial\,(F\rho)}{\partial x}. \tag{3.76}$$

Por último, a forma não linear dependente de x e ρ é descrito com o coeficiente de difusão $D = x^{(1-\nu)(1-a)} \ln(\rho)^{\nu(1-a)/a}/a$, em que $\nu \neq 1$ é uma constante. Portanto, a equação de Fokker-Planck que interpola as Eqs. (3.75) e (3.76) é dada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{x^{\gamma}(-\ln(\rho))^{\zeta}}{a}\frac{\partial \rho}{\partial x}\right) - \frac{\partial (F\rho)}{\partial x}, \tag{3.77}$$

em que $\gamma = (1-\nu)(1-a)$ e $\zeta = \nu(1-a)/a$. Essas três equações correspondem as seguintes equações estacionárias

$$\frac{x^{1-a}}{a}\frac{dy}{dx} = y, \quad \frac{[-\ln(y)]^{(1-a)/a}}{a}\frac{dy}{dx} = y, \quad \frac{x^{\gamma}\ln(y)^{\zeta}}{a}\frac{dy}{dx} = y. \tag{3.78}$$

que, por sua vez, implicam nas seguintes derivadas generalizadas

$$\mathscr{D}_x = \frac{x^{1-a}}{a}\frac{d}{dx}, \quad \mathscr{D}_y = [-\ln(y)]^{(1-a)/a}\frac{d}{dx}, \quad \mathscr{D}_{x,y} = \frac{x^{\gamma}\ln(\rho)^{\zeta}}{a}\frac{d}{dx}. \tag{3.79}$$

O último passo é obter uma forma entrópica generalizada. Prosseguimos recorrendo ao coeficiente de difusão dependente de ρ e utilizando a Eq. (3.23) com as condições de contorno $r(0) = 0$ e $r(1) = 0$. Esse cálculo nos fornece $r(\rho)$ e pode ser substituído na Eq. (3.11) para obter a forma entrópica desejada que denotaremos por S_a. Eliminando as constantes multiplicativas, temos

$$S_a = \int_{-\infty}^{\infty}\left[\Gamma\left(\frac{1}{a}+1, -\ln\rho\right) - \rho\,\Gamma\left(\frac{1}{a}+1\right)\right] dx, \tag{3.80}$$

em que $\Gamma(z, v)$ é a função de gama incompleta, definida por

$$\Gamma(z, v) = \int_{v}^{\infty} u^{z-1}e^{-u}du. \tag{3.81}$$

A entropia de Boltzmann-Gibbs é recuperada quando aplicamos $a = 1$. Essa forma entrópica é consistente com o que foi obtido na Ref. [65], que demonstrou que maximizar a entropia (3.80) fornece uma distribuição de probabilidades do tipo exponencial alongada. Aqui fizemos o passo inverso, mostrando que a distribuição implica em S_a. A forma entrópica S_a preserva algumas propriedades esperadas de uma entropia descritas no início da seção, e que foram verificadas para entropia de Boltzmann-Gibbs e Tsallis. Para isso, podemos escrever S_a na sua vertente discreta

$$S_a = \sum_{i=1}^{N} r(p_i), \qquad r(p_i) = \left[\Gamma\left(\frac{1}{a}+1, -\ln p_i\right) - p_i\,\Gamma\left(\frac{1}{a}+1\right)\right], \tag{3.82}$$

em que p_i é a probabilidade de cada estado, com $i = 1, \cdots N$. Com isso estamos prontos para listar algumas delas:

(i) S_a **é não negativa**: Para verificar essa afirmação, observe que, como $0 \leq p_i \leq 1$, a segunda derivada de $r(p_i)$ é dada por

$$\frac{d^2 r(p_i)}{dp_i^2} = -\frac{[-\ln(p_i)]^{\frac{1}{a}-1}}{ap_i} < 0 \tag{3.83}$$

ou seja, $r(p_i)$ possui concavidade negativa em todo intervalo $[0,1]$. Como $r(0) = r(1) = 0$, temos que $r(p_i)$ está sempre acima do eixo x, implicando que $r(p_i)$ e, portanto, S_a é positiva.

(ii) **Expansibilidade**: Queremos concluir que $S_a(p_1, ..., p_N) = S_a(p_1, ..., p_N, 0)$. Isso pode ser feito observando que $-\ln(0) \to \infty$, permitindo concluir que a integral (3.81) é igual a 0. Portanto, em um estado de probabilidade nula, temos que $r(0) = 0$ através da Eq. (3.82).

(iii) **Concavidade**: Essa propriedade já foi provada no item (i) ao verificar que $d^2r(p_i)/dp_i^2 < 0$.

Como consequência do teorema-H, essa entropia também respeita a propriedade de irreversibilidade.

CAPÍTULO 4

Operações algébricas generalizadas

No capítulo 2, introduzimos a mecânica estatística de Tsallis e o importante papel da q-exponencial e do q-logaritmo nesse contexto, que traduzia diversos resultados acerca da entropia e equações de difusão. Com essas duas funções foi estudado como podemos definir uma álgebra, conhecida como q-álgebra, que generaliza as operações algébricas usuais, aumentando mais ainda a semelhança entre mecânica estatística de Tsallis e mecânica estatística usual e, ainda mais, trazendo a possiblidade de novas generalizações. Já no capítulo três, expomos uma maneira de generalizar mais ainda esses aspectos estatísticos via as equações de Fokker-Planck e formas entrópicas generalizadas, mostrando o forte papel de exponenciais e logaritmos mais gerais (que incluem de Tsallis). Nesse sentido, de forma análoga a q-álgebra, somos induzidos a pensar se poderíamos introduzir álgebras generalizadas, mas dessa vez associadas a essas exponencias e logaritmos generalizados introduzidos no capítulo anterior. Esse capítulo possui como objetivo definir essa álgebra e mostrar alguns aspectos delas, e como elas reproduzem resultados particulares esperados.

4.1 Produto generalizado

Para iniciar o desenvolvimento seguinte, dependemos fortemente das exponenciais e logaritmos generalizados como definidos na seção (3.1). Para simplificar, vamos defini-los da forma mais abrangente possível. Nesse sentido, exigimos algumas características para que essas funções façam parte dessa família de generalização. Denotaremos a exponencial generalizada por $E(x)$ e sua inversa, o logaritmo generalizado, por $Ln(x)$, de forma a satisfazer as seguintes propriedades:

(i) $E(0) = 1$ e $Ln(1) = 0$,

(ii) $E(x)$ e $Ln(x)$ são monotonamente crescentes.

Não iremos especificar o domínio dessas funções para que a definição seja o mais abrangente possível. Dessa forma, o domínio depende da função a ser escolhida de maneira que ela tenha uma inversa.

A partir daqui, qualquer função respeitando essas propriedades, será chamadas de exponencial generalizado, com a inversa sendo o logaritmo generalizado.

No contexto de Tsallis, o produto $\otimes_q$ foi definido de forma que duas propriedade do produto e logaritmo que estão relacionadas a aditividade da entropia fossem conservadas. Nosso objetivo é fazer o mesmo mas para esse contexto mais abrangente. Seguindo raciocínio semelhantes ao do q-produto, precisamos, portanto, que $E(x)$ e $Ln(x)$ respeitem

$$E^x \otimes E^y = E^{x+y} \tag{4.1}$$

e

$$Ln(x \otimes y) = Ln(x) + Ln(y), \tag{4.2}$$

em que $\otimes$ é o produto generalizado. Essa operação pode ser obtido diretamente pela Eq. (4.2) tomando a exponencial $E(x)$ em ambos lados da igualdade. Fazendo isso encontramos que a generalização do produto $\otimes$ é

$$x \otimes y = E(Ln(x) + Ln(y)). \tag{4.3}$$

Perceba que no caso particular em que $E(x) = e^x$ e $Ln(x) = \ln(x)$, obtemos imediatamente o produto usual. Outro exemplo importante de se averiguar é para a q-exponencial, em que esperamos obter o q-produto. Para verificar isso, basta aplicar as Eqs. (2.19) e (2.20) na Eq. (4.3). Neste caso, o produto generalizado toma a forma

$$\begin{aligned} x \otimes y &= \exp_q\left[\ln_q(x) + \ln_q(y)\right] \\ &= \exp_q\left[\frac{x^{1-q} - 1 - (y^{1-q} - 1)}{1-q}\right] \\ &= \left[x^{1-q} + y^{1-q} - 1\right]_+^{\frac{1}{1-q}} \end{aligned} \tag{4.4}$$

que é exatamente o q-produto esperado obter.

Dessa forma, dois casos particulares, da qual essa definição de produto foi inspirada, são satisfeitos. Portanto, para avançar, vamos ver algumas propriedades desse produto generalizado

(i) **Comutatividade:** $x \otimes y = y \otimes x$

(ii) **Associatividade:** $x \otimes (y \otimes z) = (x \otimes y) \otimes z$

(iii) **Elemento neutro:** $1 \otimes x = x$

Todas essas propriedades possuem fácil verificação. Por exemplo, a associatividade pode ser provada da seguinte forma:

$$x \otimes (y \otimes z) = x \otimes [E(Ln(y) + Ln(z))] = E(Ln(x) + Ln(y) + Ln(z)). \tag{4.5}$$

Quando se generaliza um conceito, como uma operação algébrica, diversas outras generalizações surgem de forma adjacente. O próprio q-produto encontrou outros conceitos que permitiram resultados mais abrangentes, como por exemplo a q-fórmula de Stirling que é uma generalização da fórmula de Stirling usual utilizando um fatorial generalizado via q-produto.

Portanto, podemos adaptar algumas definições básicas para esse desenvolvimento algébrico, uma delas é a potência generalizada, que naturalmente definimos como

$$x^{\otimes^n} = x \otimes \cdots \otimes x = E(nLn(x)) \tag{4.6}$$

para um dado inteiro n. A partir da definição de potência generalizada emerge a seguinte propriedade para o logaritmo generalizado:

$$\begin{aligned} Ln(x^{\otimes^n}) &= Ln[E(n\,Ln(x))] \\ &= nLn(x) \end{aligned} \tag{4.7}$$

que é análoga à propriedade do logaritmo da potência, $\ln(x^n) = n \ln x$.

4.2 Soma generalizada

Para continuar a construção das operações algébricas, a próxima operação que estamos interessados em generalizar é a soma, denotada por $\oplus$. Novamente queremos conservar as propriedades (4.1) e (4.2). Aplicando o logaritmo generalizado em ambos lados da Eq. (4.1), obtemos que essa operação deve ser definida como

$$x \oplus y = Ln(E(x)E(y)) \tag{4.8}$$

O primeiro caso limite que devemos verificar é quando $E(x) = e^x$ e $Ln(x) = \ln(x)$ que, como desejamos, recai na soma usual. Enquanto a q-soma é verificada quando aplicamos a q-exponencial e o q-logaritmo, ou seja,

$$\begin{aligned} x \oplus y &= \ln_q(e_q^x e_q^y) \\ &= \ln_q((1+(1-q)x)^{\frac{1}{1-q}}(1+(1-q)y)^{\frac{1}{1-q}}) \\ &= \frac{(1+(1-q)x)(1+(1-q)y)-1}{1-q} \\ &= x + y + (1-q)xy \end{aligned} \tag{4.9}$$

que corresponde a Eq. (2.55). Listamos abaixo algumas propriedades da soma $\oplus$:

(i) **Comutatividade:** $x \oplus y = y \oplus x$,

(ii) **Associatividade:** $x \oplus (y \oplus z) = (x \oplus y) \oplus z$,

(iii) **Elemento nulo:** $0 \oplus x = x$.

Perceba que todas essas propriedades são as mesmas que valem para a soma usual, entretanto algumas propriedades como a distributiva não vale. Por exemplo, podemos verificar facilmente que a distributiva em relação ao produto usual não vale pois não se verifica a igualdade $a(x \oplus y) = ax \oplus ay$.

Novamente outras definições surgem da soma generalizada. De forma análoga a soma usual, podemos definir a soma repetida n vezes de um número x (que seria a potência na multiplicação)

$$\oplus^n x = x \oplus \cdots \oplus x = Ln([E(x)]^n). \tag{4.10}$$

Essa soma pode ser chamada de multiplicação escalar apesar de não ser igual ao produto generalizado (como ocorre no caso usual).

4.3 Divisão generalizada

Quando discutimos a q-divisão na seção 2, vimos que ela foi definida a partir da inversa do q-produto. Para definir a divisão generalizada, vamos tomar uma rota diferente. Ao invés de supor que essa operação é inversa do produto generalizado, vamos impor que a divisão generalizada $\oslash$ deve satisfazer

$$E(x) \oslash E(y) = E(x - y) \tag{4.11}$$

e

$$Ln\,(x \oslash y) = Ln(x) - Ln(y), \tag{4.12}$$

que correspondem a $\ln(x/y) = \ln x - \ln y$ e $e^{x-y} = e^x/e^y$. Para encontrar a divisão generalizada, aplicamos a exponencial generalizada na Eq. (4.12), que nos fornece

$$x \oslash y = E(Ln(x) - Ln(y)). \tag{4.13}$$

Novamente para o caso usual, o uso da exponencial e logaritmo usual na equação acima retorna para divisão usual. Enquanto para q-exponencial e q-logaritmo induzem

$$x \oslash y = \left(x^{1-q} - y^{1-q} + 1\right)^{\frac{1}{1-q}} \tag{4.14}$$

que é a q-divisão correspondente à Eq. (2.57). Já sabemos que essa divisão possui algumas restrições nos possíveis valores de x e y dependendo de q. Para o caso mais geral da divisão generalizada, essas restrições dependem fortemente da exponencial considerada, por isso não é possível especificá-las aqui. Por exemplo, se tivermos uma operação que advém de uma generalização com dois parâmetros, as restrições vão depender desses dois parâmetros.

Para ser consistente com o início da discussão dessa seção, precisamos verificar que de fato essa operação é inversa do produto generalizado. Então, considerando a relação

$$x \otimes y = 1. \tag{4.15}$$

Perceba que substituindo $y = 1 \oslash x$, encontramos a solução dessa equação, demonstrando o que esperávamos encontrar.

4.4 Diferença generalizada

Para finalizar a construção da álgebra generalizada que estamos propondo, nos falta apenas definir uma diferença generalizada. De forma semelhante à operação anterior, esperamos que ela seja inversa de outra operação, que nesse caso corresponde a soma generalizada. Mas novamente, iremos partir das propriedades dadas nas Eqs. (4.11) e (4.12). Dessa vez, entretanto, denotando a diferença generalizada por $\ominus$, esperamos que

$$\frac{E(x)}{E(y)} = E(x \ominus y) \tag{4.16}$$

e

$$Ln(x) \ominus Ln(y) = Ln\left(\frac{x}{y}\right). \tag{4.17}$$

Observando as duas relações acima, a Eq. (4.16) é a que nos proporciona a operação que desejamos encontrar. De fato tomando a função $Ln(x)$ em ambos lados, encontramos que

$$x \ominus y = Ln\left(\frac{E(x)}{E(y)}\right) \tag{4.18}$$

Como de costume, verificamos que $E(x) = e^x$ e $Ln(x) = \ln x$ nos conduzem à diferença usual. E para $E(x) = e_q^x$ e $Ln(x) = \ln_q x$, temos

$$\begin{aligned} x \ominus y &= \ln_q\left(\frac{e_q^x}{e_q^y}\right) \\ &= \frac{x-y}{1+(1-q)y}. \end{aligned} \tag{4.19}$$

que é exatamente a q-diferença exposta na Eq. (2.63). Devemos verificar também que essa operação é inversa da soma $\oplus$. De fato, basta ver que $0 \ominus x = Ln([E(x)]^{-1})$, que por sua vez, nos permite verificar que $x \oplus (0 \ominus x) = 0$.

4.5 Exemplos de álgebras

Com o fechamento da seção anterior, obtemos as operações generalizadas que fazem parte da álgebra associada a exponenciais generalizadas. Ao longo desse desenvolvimento foram considerados dois exemplos, a exponencial usual e a q-exponencial, como base dessa construção que foram verificadas como casos limites das operações algébricas generalizadas. Em particular, ao especificar a exponencial (como por exemplo a q-exponencial), a álgebra encontrada pode fornecer diversos novos resultados, mostrando a riqueza desse formalismo. Nessa seção, vamos exibir dois outros exemplos como forma de ilustração.

4.5.1 Álgebra da κ-exponencial

O primeiro exemplo que vamos considerar é aplicando a κ-exponencial introduzida no contexto de Kaniadakis na Eq. (3.59). Como é importante ter essa exponencial e sua inversa, a κ-logaritmo em mente, vamos reescrevê-las abaixo

$$e_{\{\kappa\}}^x = \left(\sqrt{1+\kappa^2x^2}+\kappa x\right)^{\frac{1}{\kappa}} \qquad \ln_{\{\kappa\}}(x) = \frac{x^\kappa - x^{-\kappa}}{2\kappa}. \tag{4.20}$$

A primeira operação a ser obtida é o produto. Para isso, aplicamos $E(x) = e_{\{\kappa\}}^x$ e $Ln(x) = \ln_{\{\kappa\}}(x)$ acima na Eq. (4.3), denotando a operação por $\otimes_\kappa$, chegamos a

$$x \otimes_\kappa y = \left(\sqrt{1 + \frac{1}{4}[x^\kappa + y^\kappa + (x^{-\kappa} + y^{-\kappa})]} + \frac{1}{2}\left[x^\kappa + y^\kappa + (x^{-\kappa} + y^{-\kappa})\right] \right)^{1/\kappa}. \quad (4.21)$$

Em seguida, vamos denotar a inversa desse produto por $\oslash_\kappa$. Para obtê-la basta fazer o mesmo procedimento na Eq. (4.13), que nos conduz a

$$x \oslash_\kappa y = \frac{1}{2\kappa} \left(\frac{\sqrt{1+\kappa^2 x^2} + \kappa x}{\sqrt{1+\kappa^2 y^2} + \kappa y} - \frac{\sqrt{1+\kappa^2 y^2} + \kappa y}{\sqrt{1+\kappa^2 x^2} + \kappa x} \right). \quad (4.22)$$

A próxima operação é a soma, denotada por $\oplus_\kappa$. Ela pode ser obtida via Eq. (4.8) e é dada por

$$x \oplus_\kappa y = x\sqrt{1+\kappa^2 y^2} + y\sqrt{1+\kappa^2 x^2} \quad (4.23)$$

que, por sua vez, possui como operação inversa diferença $\ominus_\kappa$, que usando a Eq. (4.18), é descrita por

$$x \ominus_\kappa y = \left(\sqrt{1 + \frac{1}{4}[x^\kappa + y^\kappa - (x^{-\kappa} + y^{-\kappa})]} + \frac{1}{2}[x^\kappa + y^\kappa - (x^{-\kappa} + y^{-\kappa})] \right)^{1/\kappa} \quad (4.24)$$

Nessa última operação, os valores restritivos de x e y são dados por $x^{-\kappa}+y^{-\kappa}-(x^\kappa+y^\kappa) < 4$.

Assim como a κ-exponencial e o κ-logaritmo retornam para o caso usual quando $\kappa = 0$, essas quatro operações também possuem como caso limite as operações usuais quando $\kappa \to 0$.

4.5.2 Álgebra da exponencial alongada

Como última aplicação das operações algébricas introduzidas neste capítulo, vamos considerar o caso da exponencial alongada que também já foi discutido no contexto da mecânica estatística generalizada. Apesar dessa exponencial e sua inversa já terem sido definidas nas Eqs. (3.70) e (3.71), vamos reescrevê-las abaixo

$$E_a(x) = e^{x^a} \qquad\qquad Ln_a(x) = (\ln(x))^{\frac{1}{a}}. \quad (4.25)$$

O procedimento será o mesmo realizado para os exemplos já expotos. Nesse sentido, o uso de $E(x) = E_a(x)$ e $Ln(x) = Ln_a(x)$ na Eq. (4.3) nos conduz ao produto monoparamétrico

$$x \otimes_a y = \exp\left(\left[\ln(x)^{1/a} + \ln(y)^{1/a}\right]^a \right) \quad (4.26)$$

que denotamos por $\otimes_a$. Com este produto, podemos verificar como fica a potência generalizada para essa exponencial. Pela equação (4.7), obtemos

$$\begin{aligned} x^{\otimes_a^n} &= E_a\left(Ln_a(x)\right) = e^{\left(n \ln(x)^{\frac{1}{a}}\right)^a} \\ &= e^{n^a \ln(x)} = \left(e^{\ln(x)}\right)^{n^a} \\ &= x^{n^a}. \end{aligned} \tag{4.27}$$

O próximo passo para construção da álgebra associada à exponencial alongada é encontrar a inversa $\oslash_a$ do produto $\otimes_a$. Nesse sentido, a aplicação da Eq. (4.13) nos leva a

$$x \oslash_a y = \exp\left(\left[\ln(x)^{1/a} - \ln(y)^{1/a}\right]^a\right). \tag{4.28}$$

Das definições (4.26) e (4.28), concluímos que $1 \oslash x = 1^{(-1)^a}$ é a inversa de x em relação ao produto $\otimes_a$. Entretanto, notamos imediatamente que essa inversa é extremamente restritiva, uma vez que ela existe apenas quando a é um inteiro ímpar. Por essa restrição, a aplicação de $\oslash_a$ pode ser difícil de ser realizada em um contexto amplo.

A próxima operação é a soma generalizada, $\oplus_a$. Aplicando a exponencial alongada e sua inversa na Eq. (4.8), encontramos

$$x \oplus_a y = (x^a + y^a)^{\frac{1}{a}}. \tag{4.29}$$

É interessante observar que, apesar da propriedade distributiva não valer em geral, para o caso da soma $\oplus_a$, ela continua sendo valida como segue

$$(cx) \oplus (cy) = \left[(cx)^a + (cy)^a\right]^{\frac{1}{a}} \tag{4.30}$$

$$= c\left(x^a + y^a\right)^{\frac{1}{a}} \tag{4.31}$$

$$= c(x \oplus y). \tag{4.32}$$

Além dessa propriedade, outras também podem ser verificadas para essa operação em especial. A seguir, vamos apresentar outras três:

(i) (Propriedade de inversão)

$$\begin{aligned} x \oplus_{-a} y &= \left(x^{-a} + y^{-a}\right)^{\frac{1}{-a}} \\ &= \frac{1}{\left[(x^{-1})^a + (y^{-1})^a\right]^{\frac{1}{a}}} \\ &= \frac{1}{x^{-1} \oplus_a y^{-1}} \end{aligned} \tag{4.33}$$

(ii) (Soma de potências)

$$\begin{aligned} x^n \oplus_a x^n &= \left[(x^n)^a + (y^n)^a\right]^{\frac{1}{a}} = \left[\left(x^{na} + y^{na}\right)^{\frac{1}{na}}\right]^n \\ &= (x \oplus_{na} y)^n \end{aligned} \tag{4.34}$$

(iii) (Soma iterada)

$$\oplus_a^n x = n^{\frac{1}{a}} x \qquad\qquad (\oplus_a^n x = x \oplus_a \cdots \oplus_a x) \tag{4.35}$$

Para finalizar, nos sobra apenas encontrar a diferença generalizada, que é inversa da operação $\oplus_a$. Escrita como $\ominus_a$, a Eq. (4.18), essa operação deve ser dada por

$$x \ominus_a y = (x^a - y^a)^{\frac{1}{a}} \tag{4.36}$$

Como discutido anteriormente para inversa de x em relação a $\otimes_a$, podemos fazer cálculo semelhante para encontrar a inversa de x em relação a $\oplus_a$. Nesse caso, verificamos que $0 \ominus_a x = (-1)^{\frac{1}{a}} x$ é a inversa procurada. Novamente encontramos uma relação altamente restritiva, uma vez que para evitar números complexos, a deve ser da forma $1/n$, com n inteiro. Isso significa que os valores possíveis de a, para que exista inversa em relação ao produto $\otimes_a$, estão em um conjunto disjunto (exceto quando $n = 1$) aos possíveis valores para que exista inversa em relação a soma $\oplus_a$.

Considerações finais

Neste trabalho, estudamos alguns aspectos de mecânicas estatísticas que incluem formas entrópicas, equações de Fokker-Planck, exponenciais e logaritmos generalizados. Iniciamos introduzindo os conceitos da mecânica estatística usual. Primeiramente, foram discutidas a entropia de Boltzmann-Gibbs e algumas das suas propriedades. Particularmente, obtivemos a maximização nos ensembles canônico e microcanônico. Seguimos com uma discussão sobre as interações que envolvem um sistema, de curto e longo alcances, e como isso influencia na formulação da mecânica estatística. A seguir, investigamos um pouco sobre equações de difusão e de Fokker-Planck. Vimos como ambas estão relacionadas no sentido que a equação de Fokker-Planck descreve uma difusão para um sistema descrito por meio de probabilidades. Nessa direção, expomos como seria sua solução temporal e, ao adicionarmos um termo de força, estudamos como o sistema se comportaria no estado de equilíbrio. Para finalizar essa primeira parte introdutória, fizemos a conexão entre os conceitos de forma entrópica e equação de Fokker-Planck via teorema-H, demonstrando que um sistema possui uma quantidade do tipo energia livre que sempre diminui ao tender para o equilíbrio, o que faz uma conexão com a segunda lei da termodinâmica, entretanto, via termos puramente estatísticos.

Com essa breve apresentação da mecânica estatística usual, prosseguimos para uma generalização conhecida como mecânica estatística de Tsallis. Nesse caso, iniciamos introduzindo a entropia de Tsallis que depende de um parâmetro q e possui como caso particular a de Boltzmann-Gibbs quando $q = 1$. Estudamos algumas das propriedades dessa forma entrópica como sua concavidade e não aditividade. Assim como feito no caso da entropia usual, realizamos a maximização da entropia de Tsallis, obtendo as distribuições nos ensembles microcanônico e canônico. Todo esse desenvolvimento inspirou a definição da q-exponencial e do q-logaritmo que são generalizações da exponencial e do logaritmo. Estudamos algumas características dessas funções e como elas permitem uma semelhança formal entre os resultados de Tsallis com a mecânica estatística usual. Além disso, elas também fornecem uma família de operações algébricas monoparamétricas generalizadas, conhecida como q-álgebra. Vimos que no contexto de Tsallis existe uma equação de difusão, conhecida como equação de difusão em meios porosos, que generaliza a equação de difusão usual via um parâmetro ν. Ao adicionar um termo de força, investigamos sua solução estacionária e encontramos como solução uma que envolve q-exponencial, que ao considerar um potencial harmônico, conduz a uma distribuição q-gaussiana. Para finalizar essa revisão, expomos um teorema-H que fornece uma conexão entre a forma entrópica de Tsallis com a equação de difusão em meios porosos. Nesse contexto, em particular, existe uma quantidade A que sempre tende a diminuir com o tempo.

Após os aspectos de revisão relacionados à mecânica estatística usual e à de Tsallis, partimos para a vertente mais original deste trabalho. Estudamos uma mecânica estatística generalizada mais abrangente quando comparada com a de Tsallis (contendo a de Tsallis como caso particular). Nesse caso, diferentemente dos dois capítulos anteriores, iniciamos introduzindo uma equação de Fokker-Planck generalizada cujo coeficiente de difusão podia depender de maneira bem geral da densidade e do espaço. Dessa forma, essa equação podia ser tanto linear quanto não linear. Novamente realizamos um estudo da solução estacionária quando o sistema investigado é afetado por um potencial. Nesse caso, a solução obtida inspirou a definição de uma exponencial generalizada, cuja inversa chamamos de logaritmo generalizado. O próximo passo foi definir uma forma entrópica generalizada. Fazendo isso, vimos que sua maximização nos conduzia a uma conexão com a solução estacionária da equação de Fokker-Planck via coeficiente de difusão. Todo esse procedimento foi aplicado para casos particulares. Primeiramente, verificamos a concordância dessa teoria com os resultados de Tsallis, de forma que a equação de Fokker-Planck análoga à equação em meios porosos nos levava à entropia de Tsallis. Feito isso, consideramos outros dois exemplos, de Kaniadakis e exponencial alongada, obtendo para cada um deles a forma entrópica e equações de Fokker-Planck correspondentes. Para todos esses três exemplos também foram obtidos formas lineares e não lineares da equação de Fokker-Planck. Mais uma vez, um teorema-H generalizado conectou esses conceitos. Isso mostra que qualquer estatística contida nessa generalização possui a propriedade de irreversibilidade. Para finalizar, propomos um conjunto de operações algébricas, motivada pela q-álgebra, que associa a cada exponencial (e logaritmo) generalizada uma álgebra correspondente.

Como uma das principais contribuições deste trabalho foi traçar um caminho entre formas entrópicas e equações de Fokker-Planck generalizadas por meio de um coeficiente de difusão separável em ρ e x, ainda existem investigações a serem feitas nessa linha. Particularmente, até o nosso conhecimento, não se sabe fazer essa relação quando o coeficiente de difusão depende de ρ e x de uma maneira mais geral do que investigada neste trabalho.

Bibliografia

[1] S. R. Salinas, *Introdução a física estatística*. Edusp, 1997.

[2] C. Garrod, *Statistical mechanics and thermodynamics*. Oxford University Press New York, 1995.

[3] C. Tsallis, *Introduction to nonextensive statistical mechanics: approaching a complex world*. Springer Science & Business Media, 2009.

[4] C. Tsallis, “Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics,” *Journal of statistical physics*, vol. 52, no. 1, pp. 479–487, 1988.

[5] S. Picoli Jr, R. Mendes, L. Malacarne, and R. Santos, “q-distributions in complex systems: A brief review,” *Brazilian Journal of Physics*, vol. 39, pp. 468–474, 2009.

[6] N. Gradojevic and R. Gencay, “Overnight interest rates and aggregate market expectations,” *Economics Letters*, vol. 100, no. 1, pp. 27–30, 2008.

[7] M. Kozaki and A.-H. Sato, “Application of the Beck model to stock markets: Value-at-risk and portfolio risk assessment,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 387, no. 5-6, pp. 1225–1246, 2008.

[8] T. Biró and R. Rosenfeld, “Microscopic origin of non-gaussian distributions of financial returns,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 387, no. 7, pp. 1603–1612, 2008.

[9] R. Rak, S. Drożdż, and J. Kwapień, “Nonextensive statistical features of the Polish stock market fluctuations,” *Physica A: statistical mechanics and its applications*, vol. 374, no. 1, pp. 315–324, 2007.

[10] M. Watorek, J. Kwapień, and S. Drożdż, “Financial return distributions: Past, present, and covid-19,” *Entropy*, vol. 23, no. 7, p. 884, 2021.

[11] D. Moreira, E. Albuquerque, L. da Silva, and D. Galvao, “Low-temperature specific heat spectra considering nonextensive long-range correlated quasiperiodic DNA molecules,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 387, no. 22, pp. 5477–5482, 2008.

[12] E. Lutz, "Anomalous diffusion and Tsallis statistics in an optical lattice," *Physical Review A*, vol. 67, no. 5, p. 051402, 2003.

[13] A. Dechant and E. Lutz, "Anomalous spatial diffusion and multifractality in optical lattices," *Physical Review Letters*, vol. 108, no. 23, p. 230601, 2012.

[14] E. P. Borges, "A possible deformed algebra and calculus inspired in nonextensive thermostatistics," *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 340, no. 1-3, pp. 95–101, 2004.

[15] L. Nivanen, A. Le Mehaute, and Q. A. Wang, "Generalized algebra within a nonextensive statistics," *Reports on Mathematical Physics*, vol. 52, no. 3, pp. 437–444, 2003.

[16] L. G. Moyano, C. Tsallis, and M. Gell-Mann, "Numerical indications of a q-generalised central limit theorem," *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 73, no. 6, p. 813, 2006.

[17] S. Umarov, C. Tsallis, and S. Steinberg, "On a q-central limit theorem consistent with nonextensive statistical mechanics," *Milan Journal of Mathematics*, vol. 76, no. 1, pp. 307–328, 2008.

[18] H. Suyari, "q-Stirling's formula in Tsallis statistics," *arXiv preprint cond-mat/0401541*, 2004.

[19] H. Suyari, "Mathematical structures derived from the q-multinomial coefficient in Tsallis statistics," *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 368, no. 1, pp. 63–82, 2006.

[20] B. G. da Costa and E. P. Borges, "Generalized space and linear momentum operators in quantum mechanics," *Journal of Mathematical Physics*, vol. 55, no. 6, p. 062105, 2014.

[21] W. S. Chung and H. Hassanabadi, "q-deformed quantum mechanics based on the q-addition," *Fortschritte der Physik*, vol. 67, no. 4, p. 1800111, 2019.

[22] B. G. da Costa and E. P. Borges, "A position-dependent mass harmonic oscillator and deformed space," *Journal of Mathematical Physics*, vol. 59, no. 4, p. 042101, 2018.

[23] W. S. Chung and H. Hassanabadi, "The q-boson algebra and SUq (2) algebra based on q-deformed binary operations," *International Journal of Theoretical Physics*, pp. 1–13, 2021.

[24] M. S. Ribeiro, F. D. Nobre, and E. M. Curado, "Time evolution of interacting vortices under overdamped motion," *Physical Review E*, vol. 85, no. 2, p. 021146, 2012.

[25] J. Andrade Jr, G. da Silva, A. Moreira, F. Nobre, and E. Curado, "Thermostatistics of overdamped motion of interacting particles," *Physical Review Letters*, vol. 105, no. 26, p. 260601, 2010.

[26] M. Ribeiro, F. Nobre, and E. Curado, "Overdamped motion of interacting particles in general confining potentials: time-dependent and stationary-state analyses," *The European Physical Journal B*, vol. 85, no. 12, pp. 1–12, 2012.

[27] A. R. Plastino and R. S. Wedemann, "Nonlinear Fokker-Planck equation approach to systems of interacting particles: thermostatistical features related to the range of the interactions," *Entropy*, vol. 22, no. 2, p. 163, 2020.

[28] V. Schwämmle, F. D. Nobre, and E. M. Curado, "Consequences of the H-theorem from nonlinear Fokker-Planck equations," *Physical Review E*, vol. 76, no. 4, p. 041123, 2007.

[29] V. Schwämmle, E. Curado, and F. Nobre, "Dynamics of normal and anomalous diffusion in nonlinear Fokker-Planck equations," *The European Physical Journal B*, vol. 70, no. 1, pp. 107–116, 2009.

[30] A. M. Mariz, "On the irreversible nature of the tsallis and renyi entropies," *Physics Letters A*, vol. 165, no. 5-6, pp. 409–411, 1992.

[31] J. D. Ramshaw, "H-theorems for the tsallis and renyi entropies," *Physics Letters A*, vol. 175, no. 3-4, pp. 169–170, 1993.

[32] J. Lima, R. Silva, and A. Plastino, "Nonextensive thermostatistics and the h theorem," *Physical Review Lletters*, vol. 86, no. 14, p. 2938, 2001.

[33] M. Shiino, "Free energies based on generalized entropies and h-theorems for nonlinear Fokker-Planck equations," *Journal of Mathematical Physics*, vol. 42, no. 6, pp. 2540–2553, 2001.

[34] G. Sicuro, P. Rapčan, and C. Tsallis, "Nonlinear inhomogeneous Fokker-Planck equations: Entropy and free-energy time evolution," *Physical Review E*, vol. 94, no. 6, p. 062117, 2016.

[35] M. Jauregui, A. L. Lucchi, J. H. Passos, and R. S. Mendes, "Stationary solution and H theorem for a generalized Fokker-Planck equation," *Physical Review E*, vol. 104, no. 3, p. 034130, 2021.

[36] G. Kaniadakis, "Non-linear kinetics underlying generalized statistics," *Physica A: Statistical mechanics and its applications*, vol. 296, no. 3-4, pp. 405–425, 2001.

[37] A. Macedo-Filho, D. Moreira, R. Silva, and L. R. da Silva, "Maximum entropy principle for kaniadakis statistics and networks," *Physics Letters A*, vol. 377, no. 12, pp. 842–846, 2013.

[38] S. Abe, "A note on the q-deformation-theoretic aspect of the generalized entropies in nonextensive physics," *Physics Letters A*, vol. 224, no. 6, pp. 326–330, 1997.

[39] A. RJ, "Renyi, probability theory," 1970.

[40] E. Lenzi, R. Mendes, and L. da Silva, "Statistical mechanics based on Renyi entropy," *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 280, no. 3-4, pp. 337–345, 2000.

[41] G. Kaniadakis, M. Lissia, and A. Scarfone, "Two-parameter deformations of logarithm, exponential, and entropy: A consistent framework for generalized statistical mechanics," *Physical Review E*, vol. 71, no. 4, p. 046128, 2005.

[42] V. Schwämmle and C. Tsallis, “Two-parameter generalization of the logarithm and exponential functions and Boltzmann-Gibbs-Shannon entropy,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 48, no. 11, p. 113301, 2007.

[43] F. Reif, *Fundamentals of statistical and thermal physics.* Waveland Press, 2009.

[44] D. J. MacKay and D. J. Mac Kay, *Elements of Information Theory.* Cambridge University Press, 2003.

[45] G. J. Klir, “Uncertainty and information: foundations of generalized information theory,” *Kybernetes*, 2006.

[46] J. A. T. Thomas M. Cover, *Information theory, inference and learning algorithms.* Wiley-Interscience, 2012.

[47] P. T. Landsberg, *Thermodynamics and statistical mechanics.* Courier Corporation, 2014.

[48] H. Risken, “Fokker-planck equation,” in *The Fokker-Planck Equation*, pp. 63–95, Springer, 1996.

[49] S. Abe, “Stability of Tsallis entropy and instabilities of Rényi and normalized Tsallis entropies: A basis for q-exponential distributions,” *Physical Review E*, vol. 66, no. 4, p. 046134, 2002.

[50] C. Tsallis, R. Mendes, and A. R. Plastino, “The role of constraints within generalized nonextensive statistics,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 261, no. 3-4, pp. 534–554, 1998.

[51] Z.-Q. Jiang, W. Chen, and W.-X. Zhou, “Scaling in the distribution of intertrade durations of Chinese stocks,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 387, no. 23, pp. 5818–5825, 2008.

[52] M. Politi and E. Scalas, “Fitting the empirical distribution of intertrade durations,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 387, no. 8-9, pp. 2025–2034, 2008.

[53] T. Hasumi, “Hypocenter interval statistics between successive earthquakes in the two-dimensional Burridge–Knopoff model,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 388, no. 4, pp. 477–482, 2009.

[54] A. H. Darooneh and C. Dadashinia, “Analysis of the spatial and temporal distributions between successive earthquakes: Nonextensive statistical mechanics viewpoint,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 387, no. 14, pp. 3647–3654, 2008.

[55] A. Celikoglu and U. Tirnakli, “Earthquakes, model systems and connections to q-statistics,” *Acta Geophysica*, vol. 60, no. 3, pp. 535–546, 2012.

[56] C. Tsallis, “Non-extensive thermostatistics: brief review and comments,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 221, no. 1-3, pp. 277–290, 1995.

[57] M. Muskat, “The flow of homogeneous fluids through porous media,” *Soil Science*, vol. 46, no. 2, p. 169, 1938.

[58] A. Verruijt, *Theory of groundwater flow*. Macmillan International Higher Education, 2016.

[59] M. Jauregui and C. Tsallis, “q-generalization of the inverse fourier transform,” *Physics Letters A*, vol. 375, no. 21, pp. 2085–2088, 2011.

[60] E. Lenzi, E. P. Borges, and R. Mendes, “A q-generalization of Laplace transforms,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 32, no. 48, p. 8551, 1999.

[61] J. Naudts, “Generalized thermostatistics based on deformed exponential and logarithmic functions,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 340, no. 1-3, pp. 32–40, 2004.

[62] E. Lutz and F. Renzoni, “Beyond Boltzmann–Gibbs statistical mechanics in optical lattices,” *Nature Physics*, vol. 9, no. 10, pp. 615–619, 2013.

[63] C. Beck, “Generalised information and entropy measures in physics,” *Contemporary Physics*, vol. 50, no. 4, pp. 495–510, 2009.

[64] G. Kaniadakis, “Statistical mechanics in the context of special relativity,” *Physical Review E*, vol. 66, no. 5, p. 056125, 2002.

[65] C. Anteneodo and A. R. Plastino, “Maximum entropy approach to stretched exponential probability distributions,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 32, no. 7, p. 1089, 1999.