



MARCELO TOZO DE ARAUJO

**ESTUDO DOS MÉTODOS DE SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK
LINEAR E NÃO LINEAR**

SÃO JOSÉ DO RIO PRETO - SP

07 de Janeiro de 2011

Marcelo Tozo de Araujo

**ESTUDO DOS MÉTODOS DE SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK
LINEAR E NÃO LINEAR**

Dissertação apresentada para a obtenção do título de Mestre em Biofísica Molecular, junto ao Programa de Pós-Graduação em Biofísica Molecular do Departamento de Física do Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Campus de São José do Rio Preto, São Paulo, Brasil.

Orientador: Prof. Dr. Elso Drigo Filho

São José do Rio Preto – SP,
07 de Janeiro de 2011

Araujo, Marcelo Tozo de.

Estudo dos métodos de solução da equação de Fokker-Planck linear e não linear / Marcelo Tozo de Araujo. - São José do Rio Preto : [s.n.], 2011.

71 f. : il. ; 30 cm.

Orientador: Elso Drigo Filho

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista, Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas

1. Biofísica. 2. Fokker-Planck, Equação de. 3. Sistemas não lineares. 4. Equações diferenciais estocásticas. I. Drigo Filho, Elso. II. Universidade Estadual Paulista, Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas. III. Título.

CDU – 53:519.217.4

Marcelo Tozo de Araujo

**ESTUDO DOS MÉTODOS DE SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK
LINEAR E NÃO LINEAR**

Dissertação apresentada para a obtenção do título de Mestre em Biofísica Molecular, junto ao Programa de Pós-Graduação em Biofísica Molecular do Departamento de Física do Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Campus de São José do Rio Preto, São Paulo, Brasil.

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Dr. Elso Drigo Filho
Livre-Docente
UNESP – São José do Rio Preto
Orientador

Prof. Dr. José Márcio Machado
Doutor
UNESP – São José do Rio Preto

Prof. Dr. Nelson Augusto Alves
Doutor
USP – Ribeirão Preto

São José do Rio Preto – SP,
07 de Janeiro de 2011

*Dedico este trabalho aos meus pais, **Wilton** e **Salete**, e ao meu irmão **Matheus**, pelo amor e incentivo. Em memória de meu avô pelo grande exemplo de força e serenidade diante das dificuldades.*

AGRADECIMENTOS

A Deus, por ter me dado forças para superar as dificuldades e completar esta etapa de minha vida.

Ao professor Elso, pela sua atenção, comprometimento e paciência todos estes anos.

Aos meus companheiros de grupo (Franciele, Karina, Natália, Gisele e Fabrício), que suportaram as apresentações e discussões deste trabalho.

A todos da pós-graduação, em particular, a Gisele, Isadora e Ronaldo pelo companheirismo nas horas difíceis das disciplinas, nos churrascos do departamento e vários outros momentos alegres deste período.

De maneira especial, agradeço a Patrícia, Gabriel, Natália, Luciane, Nayara entre outros que pela amizade, paciência e apoio desde o início da graduação tem o meu mais profundo respeito e admiração.

Também agradeço através deste trabalho a Tabata, Tamará, Kuririn e outros que começaram esta jornada comigo e apesar de hoje estarem distantes são como irmãos e sempre estarão em minhas lembranças. Meus mais sinceros votos de felicidades a vocês.

Aos amigos da minha graduação (Jean, Adalberto, Adriano, Guilherme e Fernanda) que apesar de não terem participado diretamente desta fase da minha vida acadêmica compartilharam muitos momentos alegres da minha pessoal.

De maneira geral, agradeço aos amigos que estão encerrando ou apenas começando a graduação pela paciência e companheirismo nas brincadeiras do departamento.

A Ilva, Paulinho, Barbosa, Marcelino, Tiago e Esther pela paciência, atenção e solicitude todos estes anos. Que mantenham sempre esta alegria e simpatia que demonstram.

Por fim, aos professores José R. Ruggiero, Chahine, Sidney, Márcio e demais professores deste departamento que dedicaram parte de seu tempo para compartilhar um pouco do conhecimento que possuem. Minha mais profunda admiração e respeito, obrigado.

"Sem sonhos, a vida não tem brilho. Sem metas, os sonhos não têm alicerces. Sem prioridades, os sonhos não se tornam reais. Sonhe, trace metas, estabeleça prioridades e corra riscos para executar seus sonhos. Melhor é errar por tentar do que errar por omitir!" (Augusto Cury)

RESUMO:

Este trabalho versa sobre difusão anômala, especificamente a proposição e solução exata e aproximada de um conjunto de equações não lineares de difusão. Primeiramente é apresentada a solução de dois sistemas sujeitos a difusão normal para explicitar a restrição que há em métodos de solução para a equação de difusão não linear. Em seguida, focamos o trabalho em processos anômalos mostrando, inicialmente a solução estacionária que maximiza a entropia de Tsallis. Sua solução exata é uma gaussiana generalizada que unifica o comportamento tipo lei de potência e exponencial alongada. Para um dos casos solucionados é incluído na equação um termo de fonte dependente da parte temporal da probabilidade. As soluções analíticas encontradas são analisadas para diferentes valores de não linearidade, caracterizando processos sub ou super difusivos, embora ao se considerar uma equação não linear, uma escolha conveniente na dependência temporal dos coeficientes também conduz a esses processos. Neste caso, equações não lineares com solução não gaussiana podem conduzir à difusão usual, da mesma forma que surgem anomalias em processos descritos por equações lineares e solução gaussiana. Por fim, a equação do tipo Fokker-Planck não linear é solucionada através do emprego de método numérico visando uma forma alternativa para analisar sistemas que não permitem obter uma solução exata da equação.

ABSTRACT:

This work describes anomalous diffusion, specifically the proposition and exact and approximate solution of a set of nonlinear equations of diffusion. First is shown the solution solve of two systems subject to normal diffusion to exhibit the restriction that exist in solution methods for nonlinear diffusion equation. After, we focus on the work showing anomalous processes, initially stationary solution which maximizes the entropy purpose of Tsallis. Its exact solution is a generalized Gaussian that unifies behavior power law and stretched exponential. For one of the solved cases is included in the equation a source term dependent on the temporal part of probability. The analytical solutions found are analyzed for different values of nonlinearity characterizing diffusion processes under or over, although when considering a nonlinear equation, a convenient choice in the time dependence of the coefficients also leads to these processes. In this case, nonlinear equations with non-Gaussian solution can lead to the usual diffusion, similar anomalies that arise in processes described by linear equations and Gaussian solution. Finally, the equation of nonlinear Fokker-Planck is solved by employing numerical method seeking an alternative way to analyze systems that do not achieve an exact solution of the equation.

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	1
2. SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK LINEAR PARA ESTADOS CONTÍNUOS	4
2.1. OBTENÇÃO DA EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK	5
2.2. MÉTODO DE SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK:.....	7
2.3. POTENCIAL DE ROSEN-MORSE	10
2.4. POTENCIAL “HARMÔNICO” FINITO	14
3. MÉTODOS DE SOLUÇÃO	17
3.1. SOLUÇÃO ESTACIONÁRIA.....	17
3.2. SOLUÇÃO TEMPORAL	19
3.3. MÉTODO NUMÉRICO.....	20
4. SOLUÇÕES EXPLÍCITAS	24
4.1. PARTÍCULA CONFINADA	24
4.2. POTENCIAL HARMÔNICO	27
4.3. POTENCIAL COM BARREIRA	30
5. ANÁLISE DOS RESULTADOS EXPLÍCITOS	36
5.1. PARTÍCULA CONFINADA	36
5.2. POTENCIAL HARMÔNICO	39
5.3. POTENCIAL COM BARREIRA	42
6. ANÁLISE NUMÉRICA.....	44
6.1. ELIMINAÇÃO DE GAUSS	45
6.2. RESULTADOS	48
7. CONCLUSÃO	54
REFERÊNCIAS:.....	57

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Gráfico ilustrativo do potencial de Rosen-Morse simétrico (2.3.1) com $U_0 = 20$ e $\alpha = 1$.	12
Figura 2: Gráfico comparativo entre a distribuição de probabilidade (2.3.1) e resultados numéricos para a) $t = 10^{-3}$ e b) $t = 0.5$.	13
Figura 3: Gráfico comparativo entre a distribuição de probabilidade (2.3.11) e resultados numéricos para a) $t = 1$ e b) $t = 3$.	13
Figura 4: Gráfico ilustrativo do potencial harmônico finito com constante elástica (k) igual a 0.75 e $d = 2$.	15
Figura 5: Gráfico da distribuição de probabilidade (2.4.3) a) tempos pequenos e b) tempos grandes, com parâmetros $Q = 4$, $k = 0,75$.	15
Figura 6: Modelo de malha de uma equação diferencial fracionada.	20
Figura 7: Região de confinamento da partícula ($-L/2 \leq x \leq L/2$).	24
Figura 8: Gráfico representativo do potencial com barreira dado por (4.3.1).	30
Figura 9: Os gráficos acima mostram a evolução da Probabilidade em um intervalo de tempo t de 0 a 5u com $\nu = 0,5$.	37
Figura 10: Gráfico representativo da evolução da Probabilidade em um intervalo de tempo $t = 5u$ com $\nu = 1,5$.	37
Figura 11: O gráfico acima mostra o comportamento de $P(x,t)$ em um intervalo de tempo $t = 5$ com $\nu = 2$.	38
Figura 12: O gráfico acima mostra o comportamento de $P(x,t)$ em para um ponto fixo no espaço ($x = 0$) para diferentes valores de tempo e ν .	39
Figura 13: Gráficos representando a evolução temporal de $P(x,t)$ considerando $\nu = 0,5$.	40
Figura 14: Gráfico representando a evolução temporal de $P(x,t)$ considerando $\nu = 1,5$.	40
Figura 15: Gráfico correspondente ao comportamento de $P(x,t)$ em para um ponto fixo no espaço ($x = 0$) para diferentes valores de tempo e ν .	41

Figura 16: Gráfico da distribuição de probabilidade contra um tempo t .	42
Figura 17: Gráfico da distribuição de probabilidade em $x = 0$ versus v para diferentes valores de tempo.	43
Figura 18: Gráfico do potencial de Morse versus a posição x , usando $D = 1$, $C = -1$ e $a = 1$.	45
Figura 19: Comparação entre $P(x,t)$ obtido a partir da eq. (6.2.1) e o resultado fornecido pelo algoritmo para $t = 1u$.	48
Figura 20: Gráfico de $P(x,t)$ contra x com $t = 5u$ para a solução analítica e a numérica.	49
Figura 21: Gráfico de $P(x,t)$ para $t = 10$ unidades comparando resultado analítico com o numérico.	49
Figura 22: Gráfico de probabilidade (6.2.3) versus x para diferentes tempos.	50
Figura 23: Gráfico de $P(x,t)$ versus x para diferentes tempos.	51
Figura 24: Gráfico de $P(x,t)$ para t pequenos, comparando o resultado analítico com o numérico.	52
Figura 25: Gráfico de $P(x,t)$ para $t=1$, comparando o resultado o numérico com (6.2.7).	53
Figura 26: Comparação entre $P(x,t)$ obtido a partir da eq. (6.2.7) e o resultado fornecido pelo algoritmo para t maiores	53

1. INTRODUÇÃO

O século XIX foi marcado por uma série de avanços e descobertas como o estabelecimento da lei da Conservação de Energia por Joule, a formulação da teoria do eletromagnetismo descrito pelas equações de Maxwell ou os estudos de Thompson sobre a natureza do elétron. Entre estes e vários acontecimentos vale ressaltar aqui o desenvolvimento do formalismo termodinâmico por Gibbs que posteriormente permitiu o surgimento da mecânica estatística de Boltzmann e observações de Robert Brown referentes ao movimento aleatório de partículas em um fluido, que posteriormente foi claramente descrito por Einstein.

Este movimento aleatório é mais comumente conhecido como movimento browniano e é matematicamente representado pela equação de Langevin. O movimento browniano ocorre devido ao choque com partículas vizinhas ou através da interação com algum sistema externo. Como as partículas em um líquido há vários outros fenômenos similares, por exemplo, as flutuações de corrente que existem em uma resistência elétrica [1] mostram claramente as flutuações em um sistema.

A equação de Fokker-Planck (EFP), primeiramente foi aplicada a problemas relacionados ao movimento Browniano, lidando com flutuações originadas de vários pequenos distúrbios, que faziam as moléculas se chocarem com partículas ao seu redor, criando um caminho imprevisível. Devido a estas flutuações, tornava-se impossível determinar a posição exata delas, mas era possível determinar a probabilidade de achá-la em certa região.

Esta equação pode ser obtida da equação de Langevin e fornece a probabilidade de encontrar determinada partícula em uma posição x em certo instante t [2 - 3]. Outras aplicações da equação de Fokker-Planck (EFP) podem ser encontradas na literatura, por exemplo, estudos de tensor de atrito molecular para movimentos rotacionais e translacionais de partículas Brownianas próximas a superfícies [4], análise do comportamento de íons grandes ou pesados em fluidos submetidos a campo elétrico [5], entre outros.

A equação de Fokker-Planck em uma dimensão espacial é dada por:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}[f(x) \cdot P(x,t)] + Q \frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2}, \quad (1.1)$$

sendo $P(x,t)$ a distribuição de probabilidade, Q o coeficiente de difusão e $f(x)$ a força externa que age no sistema.

Uma característica interessante desta equação é que a distribuição de probabilidade obtida quando a solucionamos maximiza a entropia proposta por Gibbs-Boltzmann: $\sum_i^W P(x,t) \ln P(x,t)$, e permite retirarmos toda descrição termodinâmica e estatística do sistema. A EFP descreve muito bem o comportamento de muitos sistemas existentes, que são caracterizados por uma flutuação proporcional a variação de tempo e há uma interação de curto alcance entre as partículas [6].

Quando consideramos sistemas anômalos, isto é, onde as flutuações ocorrem de forma desproporcional ao tempo e existe a presença de interações de longo alcance entre as moléculas, a equação de Fokker-Planck habitual (1.1) não é capaz de descrever satisfatoriamente o sistema pretendido [7 - 8]. Para contornar este problema, a EFP deve ser reescrita como:

$$\frac{\partial P(x,t)^\mu}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}[f(x)P(x,t)^\mu] + Q \frac{\partial^2 [P(x,t)]^\nu}{\partial x^2} \quad (1.2)$$

Como pode ser observado, a diferença entre (1.1) e (1.2) é a presença dos índices μ e ν em $P(x,t)$ [9]. Estes índices são constantes reais que devem ser ajustadas de acordo com o sistema analisado e que podem ser relacionados ao processo de difusão anômala em sistemas biológicos [10 - 13]. Quando $\mu = 1$ a distribuição de probabilidades fornecida por (1.2) está intimamente associada a sistemas não-extensivos e maximizam a entropia proposta por Tsallis [14 -15] que é uma generalização da entropia de Gibbs-Boltzmann. Nessa condição a equação (1.2) se reduz a seguinte equação diferencial:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}[f(x)P(x,t)] + Q \frac{\partial^2 [P(x,t)]^\nu}{\partial x^2}. \quad (1.3)$$

Equações diferenciais parciais não-lineares, como a equação (1.3), são difíceis de serem trabalhadas, explicando o fato de haver poucas soluções explícitas da Fokker-Planck generalizada na literatura. Contudo, há a possibilidade do emprego de métodos numéricos para obter soluções aproximadas que permitem obter uma boa noção do comportamento das soluções em certo intervalo de tempo. Um destes métodos é o de diferença finita [16 - 17], que consiste na discretização do espaço contínuo da função $P(x,t)$. A grande desvantagem deste método é que para obter soluções mais próximas

possíveis da solução analítica da equação é necessário um grande esforço computacional.

O foco principal deste trabalho é apresentar um estudo da solução da equação de Fokker-Planck não linear. Inicialmente é feita uma breve revisão do método de solução da equação (1.1) via associação com a equação de Schroedinger e através de dois exemplos. Neste caso, é demonstrado um método de solução específico da equação de Fokker-Planck linear quando possuo um modelo de estados contínuos.

A equação de Fokker-Planck não-linear é estudada para dois modelos que apresentam solução na literatura [18], mais especificamente, o potencial harmônico e na ausência de potencial ($V(x) = 0$). Também a resolveremos para um caso especial onde há a presença de um termo de fonte na equação de Fokker-Planck que permite a solução para um modelo de barreira de potencial. Por fim, é mostrada uma comparação dos resultados analíticos da literatura com a solução obtida através do método numérico.

Na sequência, capítulo 2, é mostrada a derivação da equação de Fokker-Planck através da equação de Langevin (1.1.1) e feita uma breve discussão sobre a equação linear de Fokker-Planck seguido da resolução de dois exemplos particulares. No capítulo 3 discutimos alguns métodos de solução da equação de Fokker-Planck não linear. O capítulo 4 apresenta as soluções obtidas para três sistemas distintos, mais especificamente, o potencial harmônico e na ausência de potencial, cujas soluções existem na literatura e a solução para um modelo com barreira, que exige a introdução de um termo de fonte na equação diferencial.

No capítulo seguinte, exibimos os gráficos referentes à evolução temporal de $P(x,t)$ para cada sistema seguido de uma breve discussão. O sexto capítulo discute de forma mais aprofundada a maneira como foi aplicado o método numérico, introduzido no capítulo 3, com a apresentação da solução computacional da EFP linear e não linear para alguns modelos com a finalidade de analisar o quanto esta solução é satisfatória. Por fim, o capítulo 7 apresenta as conclusões deste trabalho.

2. Solução da equação de Fokker-Planck linear para estados contínuos

A equação de Fokker-Planck linear tem caráter central no estudo de fenômenos estocásticos [3]. Estes fenômenos aparecem em diversos contextos físicos, em particular, para descrever sistemas biológicos, tais como enovelamento de proteínas [5] ou o transporte por membranas [19]. Como apresentado anteriormente, ela é dada por (1.1):

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

sendo t a variável temporal e x a variável característica do sistema (pode ser identificada, por exemplo, com a velocidade [20]). A função $f(x)$ é conhecida como sendo a força externa que age sobre o sistema, embora esse termo só seja apropriado quando x representa a velocidade. Q corresponde à constante de difusão e $P(x, t)$ é a distribuição de probabilidades.

A distribuição $P(x, t)$ permite obter várias informações sobre o sistema como, por exemplo, sua entropia e energia livre. Entretanto, obter a solução da Fokker-Planck (1.1) é difícil. Alguns poucos casos na literatura são tratados de forma analítica, um exemplo corresponde a sistemas onde a interação é harmônica [3], outro exemplo é obtido quando $f(x)$ é nula [1].

Dada a importância e dificuldade de solucionar a equação de Fokker-Planck, diferentes métodos têm sido sugeridos para estudá-la. Destaca-se o tratamento numérico por diferenças finitas [21], método usando polinômios de Adomian [22] e o mapeamento da EFP em uma equação tipo Schroedinger [3].

Em particular, o uso da relação entre a equação de Schroedinger e a de Fokker-Planck tem-se mostrado bastante útil, embora tenha sido pouco explorada. Apenas potenciais confinantes têm possibilitado soluções completas [3]. Potenciais não confinantes também têm sido tratados [23], porém de forma parcial sem discutir a parte contínua do espectro.

Neste capítulo é sugerida uma forma completa para solução de problemas com interações considerando a distribuição de probabilidade como sendo composta de termos da série que possuam autovalores discretos da equação de Schroedinger associada e um complemento para a parte cujo espectro seja contínuo. Dessa forma, é possível ampliar o número de problemas com solução da EFP através de uma maneira simples e eficaz. Como exemplos, são estudados sistemas que remetem a dois potenciais não confinantes, o potencial de Rosen-Morse e um potencial “harmônico” finito, que envolvem um poço de potencial de altura limitada.

Do ponto de vista quântico, estes potenciais são muito úteis para descrever energias de vibração em moléculas como NH_3 ou interação em haletos de hidrogênio [24, 25]. Em potenciais como estes, quando as partículas estão localizadas dentro do poço de potencial seus autovalores de energia são discretos. Entretanto, quando possuem energia para estarem fora do poço seus autovalores são contínuos.

2.1. Obtenção da equação de Fokker-Planck

A equação de Fokker-Planck é derivada da equação de Langevin [9];

$$\frac{dx}{dt} = M(x, t) + g(x, t) \cdot \eta(t), \quad (2.1.1)$$

onde a variável estado de uma partícula browniana ($x(t)$) é dada pelas funções $M(x, t)$, $g(x, t)$ e $\eta(t)$ que representa um ruído com as seguintes características:

$$\langle \eta(t) \rangle = 0 \quad \langle \eta(t)\eta(t') \rangle = \langle \eta(t)^2 \rangle = \delta(t - t'). \quad (2.1.2)$$

Vamos considerar uma dada distribuição de probabilidade $f(x, t)$ de uma partícula transitar de um estado x para x' , em um tempo $t + \Delta t$, tal que,

$$f(x, t) = \int P(x, t + \Delta t | x', t) f(x', t) dx', \quad (2.1.3)$$

sendo $P(x, t + \Delta t | x', t)$ a probabilidade de transição entre os estados. Expandindo o integrando da equação (2.1.3) em série de Taylor na vizinhança de x , obtêm-se:

$$\begin{aligned} P(x, t + \Delta t | x', t) f(x', t) = & \left\{ -\Delta x \frac{d}{dx} P(x + \Delta x, t + \Delta t | x', t) + \right. \\ & \left. + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{d^2}{dx^2} P(x + \Delta x, t + \Delta t | x', t) - \dots \right\} f(x', t). \end{aligned} \quad (2.1.4)$$

Integrando (2.1.4) em $d(\Delta x)$, obtemos:

$$f(x, t + \Delta t) = \left\{ -\frac{d}{dx} \langle \Delta x \rangle + \frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \langle (\Delta x)^2 \rangle + \dots \right\} f(x, t) \quad (2.1.5)$$

Utilizando a equação de Langevin (2.1.1), podemos definir $\langle \Delta x \rangle$ e $\langle \Delta x^2 \rangle$. Para o primeiro caso, temos que,

$$\langle \Delta x \rangle = \left\langle \int_t^{t+\Delta t} \dot{x} dt' \right\rangle \quad (2.1.6)$$

ou ainda,

$$\langle \Delta x \rangle = \left\langle \int_t^{t+\Delta t} M(x, t') dt' \right\rangle + \left\langle \int_t^{t+\Delta t} g(x, t') d(w(t')) \right\rangle \quad (2.1.7)$$

O integrando $d(w(t'))$ é igual a $\eta(t') dt'$. Utilizando as propriedades de $\eta(t)$ (2.1.2), vemos que a segunda integral se anula, pois $\langle d(w(t')) \rangle = 0$ e assim,

$$\langle \Delta x \rangle = M(x, t) \cdot \Delta t. \quad (2.1.8)$$

Para a segunda média, $\langle \Delta x^2 \rangle$, o procedimento é semelhante. Temos, então, que,

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \int_t^{t+\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \langle g(x, t') g(x, t'') \rangle \cdot \langle d(w(t')) \cdot d(w(t'')) \rangle, \quad (2.1.9)$$

mas $\langle d(w(t')) \cdot d(w(t'')) \rangle$ é igual $\delta(t' - t'') \cdot dt'$. Desta forma,

$$\langle \Delta x^2 \rangle = g(x, t)^2 \Delta t. \quad (2.1.10)$$

Substituindo (2.1.8) e (2.1.10) em (2.1.5) obtemos a equação de Fokker-Planck generalizada, onde $M(x, t)$ é a força externa agindo no sistema. Se $g(x, t)$ for uma função constante ($Q^{1/2}$) teremos que (2.1.5) pode ser escrita como:

$$f(x, t + \Delta t) = \left\{ -\frac{d}{dx} [M(x, t) \Delta t] + \frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} [Q \Delta t] + \dots \right\} f(x, t). \quad (2.1.11)$$

Considerando o limite de $\Delta t \rightarrow 0$ na expressão acima, chegamos a forma linear da EFP, tal que,

$$\frac{\partial}{\partial t} f(x, t) = \left\{ -\frac{\partial}{\partial x} M(x, t) + \frac{Q}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right\} f(x, t). \quad (2.1.12)$$

Para obtermos a forma não linear (1.3), devemos considerar que a relação (2.1.9) fornece uma função $g(x, t)$ que depende da probabilidade, isto é, o coeficiente de difusão não é mais constante. Ou seja:

$$g(x, t)^2 = Q \cdot f(x, t)^{\nu-1}. \quad (2.1.13)$$

Utilizando esta nova relação para $g(x, t)$ e também (2.1.13) em (2.1.5) encontramos a forma não linear da EFP (1.3)

$$\frac{\partial}{\partial t} f(x, t) = \left\{ -\frac{\partial}{\partial x} M(x, t) + \frac{Q}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [f(x, t)^{v-1}] \right\} f(x, t). \quad (2.1.14)$$

A equação de Langevin fornece o trajeto médio das partículas no meio, quando sujeitas a uma força externa $M(x, t)$. Se substituirmos a função $g(x, t)$ de (2.1.1) pela definição (2.1.13), obtemos a eq. de Langevin para o caso não linear:

$$\frac{dx}{dt} = M(x, t) + \sqrt{Q} f(x, t)^{(v-1)/2} \eta(t). \quad (2.1.15)$$

2.2. Método de solução da Equação de Fokker-Planck:

A solução da equação de Fokker-Planck (1) pode ser obtida através do método de separação de variáveis [3] reescrevendo a função $P(x, t)$ como

$$P(x, t) = P(x)T(t). \quad (2.2.1)$$

Utilizando esta relação, a equação (1) é separada em duas expressões,

$$\begin{cases} \frac{1}{T(t)} \frac{d}{dt} T(t) = \lambda_l \\ \frac{1}{P(x)} \left[-\frac{d}{dx} (f(x)P(x)) + Q \frac{d^2}{dx^2} P(x) \right] = \lambda_l \end{cases} \quad (2.2.2)$$

em que a constante λ_l é a constante de separação. A solução da primeira equação do sistema (2.2.2) será dada na forma $T(t) \propto e^{-t|\lambda_l|}$ e a solução da segunda equação deste sistema pode ser escrita na forma de série de funções. Desta forma, a distribuição $P(x, t)$ é escrita como

$$P(x, t) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l \phi_l(x) e^{-t|\lambda_l|}, \quad (2.2.3)$$

sendo $\phi_l(x)$ as autofunções e λ_l os autovalores obtidos das equações (2.2.2). O primeiro autovalor da série é nulo ($\lambda_0 = 0$), logo, para um tempo $t \rightarrow \infty$, temos a solução representada apenas pela primeira autofunção ($l = 0$) da série. Esta distribuição, neste caso, é dita estacionária, pois independe do tempo e é definida de maneira geral por,

$$\phi_0(x) \propto e^{-\int f(x) dx / Q}. \quad (2.2.4)$$

A parte em x da equação (2.2.2) pode ser reescrita como uma equação tipo Schrodinger [3], dada como,

$$\lambda_l \psi_l = -\frac{\Psi_l}{2} \left\{ \frac{df(x)}{dx} + \frac{f(x)^2}{2Q} \right\} + Q \frac{d^2 \Psi_l}{dx^2} \quad (2.2.5)$$

tal que, as funções $\phi_l(x)$ de solução em série apresentada, equação (2.2.3), passam a ser definidas pela relação,

$$\phi_l(x) = \Psi_0(x)\Psi_l(x). \quad (2.2.6)$$

O termo entre chaves da expressão (2.2.5) é denominado como potencial efetivo e associado ao potencial da equação de Schroedinger,

$$v_{ef}(x) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{df(x)}{dx} + \frac{f(x)^2}{2Q} \right\}. \quad (2.2.7)$$

Os coeficientes a_l presentes na equação (2.2.3) podem ser obtidos através da propriedade de ortogonalidade das funções $\Psi_l(x)$ [20]. Adotando como condição inicial que no instante $t = 0$ a distribuição $P(x,0)$ seja igual a $\delta(x)$, multiplicando ambos os lados da série (2.2.3) por $\Psi_l(x)/\Psi_0(x)$ e integrando em x , obtemos:

$$a_l = \frac{\Psi_l(0)}{\Psi_0(0)} \quad (2.2.8)$$

Usualmente a solução analítica obtida através da associação da Fokker-Planck com Schroedinger (2.2.5) apresenta limitação, uma vez que apenas uma quantidade limitada de termos desta série é usada e os termos referentes a autovalores contínuos não são considerados (vide, por exemplo, referência [3]).

Uma maneira geral de tornar a solução analítica mais “completa” é introduzir no formalismo os estados contínuos. Isso pode ser feito através de um tratamento semelhante ao feito quanticamente para estados livres [26]. O ponto de partida para tal tratamento é um poço quadrado infinito, onde o potencial é zero para $-L/2 \leq x \leq L/2$ e infinito fora dessa região. A equação tipo Schroedinger derivada da equação (2.2.3) nesse caso é dada por:

$$\lambda_l \psi_l = Q \frac{d^2 \Psi_l}{dx^2} \quad (2.2.9)$$

Como a força é nula, a derivada de primeira ordem também se anula restando apenas os termos acima. A equação diferencial (2.2.9) tem solução conhecida [26] e é dada por,

$$\Psi(x) = A \cdot \cos(\alpha x), \quad (2.1.10)$$

em que α é dado por $\alpha^2 = \lambda_l/Q$.

Utilizando a relação (2.1.4) e o fato que $\phi_0(x) = P(x, 0)$, é possível definir o valor da constante A pela relação de normalização: $\int_{-L/2}^{L/2} \phi_0(x) dx = 1$. O valor obtido é $A = 1/\sqrt{L}$

e a função $\phi_l(x)$ é dada por

$$\phi_l(x) = \frac{1}{L} \cdot \cos\left(\frac{l\pi}{L}x\right). \quad (2.2.11)$$

Nessas condições, a distribuição de probabilidade pode ser escrita [3] como sendo uma série similar aquela indicada em (2.2.2):

$$P(x, t) = \frac{1}{L} \sum_{l=0}^{\infty} a_l \cos(\alpha_l x) e^{t|\lambda_l|}, \quad (2.2.12)$$

onde os autovalores λ_l são obtidos pela relação:

$$\alpha_l = \sqrt{\frac{\lambda_l}{Q}} = \frac{l\pi}{L}. \quad (2.2.13)$$

o que implica em: $\lambda_l = l^2 \pi^2 Q / L^2$.

Por fim, para calcular os termos a_l da somatória, vamos utilizar a relação (9), tal que, para esse caso, fornece uma relação simples:

$$a_l = \frac{\Psi_l(0)}{\Psi_0(0)} = 1 \quad (2.2.14)$$

Desta maneira, substituindo este valor na equação (2.2.12), obtemos a distribuição de probabilidade $P(x, t)$:

$$P(x, t) = \frac{1}{L} + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{L} \cos\left(\frac{l\pi x}{L}\right) e^{-t|\lambda_l|}. \quad (2.2.15)$$

A equação (2.2.15) representa a distribuição de probabilidade quando L é finito. Formalmente, para obter a expressão para o sistema livre se toma o limite de L tendendo a infinito. Nesse caso, o argumento da função co-seno tende a zero. Nesse limite a somatória pode ser aproximada por uma integral o que permite encontrar uma expressão fechada para a distribuição de probabilidade:

$$P(x, t) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} e^{-t\lambda^2 Q} \cos(\lambda x) d\lambda = \frac{1}{\sqrt{4\pi t Q}} e^{-x^2/tQ}. \quad (2.2.16)$$

Essa expressão representa a distribuição quando se tem estados livres e pode ser adotada para completar a solução da EFP quando a equação de Schroedinger associada possuir estados contínuos.

Segundo o método proposto, a solução geral da EFP que conduz a uma equação tipo Schroedinger com potencial simétrico e que possui parte dos autovalores discretos e parte contínuos seria então constituída de duas partes, a primeira para autovalores discretos e a segunda com autovalores contínuos (dada pela eq. (2.2.16)). Assim, a forma geral de $P(x,t)$, equação (2.2.3), é dada por:

$$P(x,t) = \sum_{l=0}^N a_l \Psi_0(x) \Psi_l(x) e^{-t|\lambda_l|} + \frac{1}{\sqrt{4\pi Q t}} e^{-x^2/tQ}, \quad (2.2.17)$$

onde N é o número de soluções discretas.

2.3. Potencial de Rosen-Morse

O potencial de Rosen-Morse simétrico [27] é dado por:

$$v(x) = -\frac{U_0}{\alpha^2} \frac{\operatorname{sech}(\alpha x)}{\cosh(\alpha x)}, \quad (2.3.1)$$

U_0 corresponde à profundidade do potencial e α a largura do poço. Considerando a EFP com a força dada por:

$$f(x) = -b \tanh(\alpha x) \quad (2.3.2)$$

temos que o potencial efetivo (2.2.7) da equação tipo Schroedinger (2.2.6) é igual a

$$v_{ef}(x) = \frac{b^2}{4Q} - \left(\frac{b^2}{4Q} + \frac{b}{2} \right) \operatorname{sech}^2(\alpha x), \quad (2.3.3)$$

Igualando o potencial efetivo (2.3.3) com o potencial de Rosen-Morse (2.3.1) associamos à constante b de (2.3.2) com U_0 e α através da relação:

$$b = \frac{1}{2} \left[-1 \pm \left(1 + \frac{4U_0}{\alpha^2} \right)^{1/2} \right] \quad (2.3.4)$$

Desta forma, a equação associada de Fokker-Planck (2.3.5) é escrita como,

$$\Lambda_l \Psi_l = -\frac{U_0}{\alpha^2} \frac{\operatorname{sech}(\alpha x)}{\cosh(\alpha x)} \Psi_l + Q \frac{d^2 \Psi_l}{dx^2}, \quad (2.3.5)$$

tal que, Λ_l vale

$$\Lambda_l = \lambda_l - \frac{b^2}{4Q} \quad (2.3.6)$$

e permite relacionar os autovalores λ_l da equação (2.3.3) com a solução da equação (2.3.5).

A solução da equação de Schroedinger para o potencial de Rosen-Morse é conhecida [27], assim, com os parâmetros usados na equação (2.3.5) as autofunções para os estados ligados podem ser escritas como:

$$\Psi_l(x) = A_l \cosh^{-s+l}(\alpha x) F(-l, 2s-l+1, s-l+1, u) \quad (2.3.7)$$

sendo $F(-l, 2s-l+1, s-l+1, u)$ uma função hipergeométrica e os termos u , e s são definidos pelas seguintes relações:

$$u = \frac{[1 + \tanh(\alpha x)]}{2} \quad \text{e} \quad s = \frac{1}{2} \left[-1 + \left(1 + \frac{4U_0}{\alpha^2} \right)^{1/2} \right]. \quad (2.3.8)$$

A constante de normalização A_l , nesse caso, vale:

$$A_l = \left[\frac{\Gamma(3+l)\Gamma(s-4)\Gamma(2s-4+l)}{\Gamma(3-l+1)\Gamma(2s-2)\Gamma(s-2+l)\Gamma(l+1)} \right]^{1/2}. \quad (2.3.9)$$

Complementarmente os autovalores para os níveis discretos, λ_l , são dados por

$$\lambda_l = (s-l)^2 - \frac{1}{2}s^2. \quad (2.3.10)$$

com $l \leq s$. Assim, a solução da equação de Fokker-Planck como proposto na equação (2.2.17) e para $f(x)$ dado pela equação (2.3.2) é escrita como

$$P(x, t) = \sum_{l=0}^N \left\{ \frac{a_l \Gamma(3+l)\Gamma(s-4)\Gamma(2s-4+l) \cosh(\alpha x)^{-s+l} F(-l, 2s-l+1, s-l+1, u)}{\Gamma(3-l+1)\Gamma(2s-2)\Gamma(s-2+l)\Gamma(l+1)} \cdot e^{-t\lambda_l} \right\} + \frac{1}{2\sqrt{Q\pi t}} e^{-x^2/tQ}. \quad (2.3.11)$$

sendo N o número de estados discretos da equação de Schroedinger e as constantes a_l são determinadas conforme a relação (2.3.10).

Como indicado na seção anterior, à função gaussiana se refere à região acima do potencial onde os autovalores são contínuos. A somatória se refere a contribuição dos estados discretos à composição da probabilidade $P(x, t)$. Para ilustrar a solução obtida um conjunto especificado de parâmetros é usado, são eles $U_0 = 20$ e $\alpha = 1$. Com esses parâmetros o potencial de Rosen-Morse admite a existência do estado fundamental e mais três estados excitados dentro do poço. A representação gráfica para esse potencial com os parâmetros adotados é dada pela figura 1.

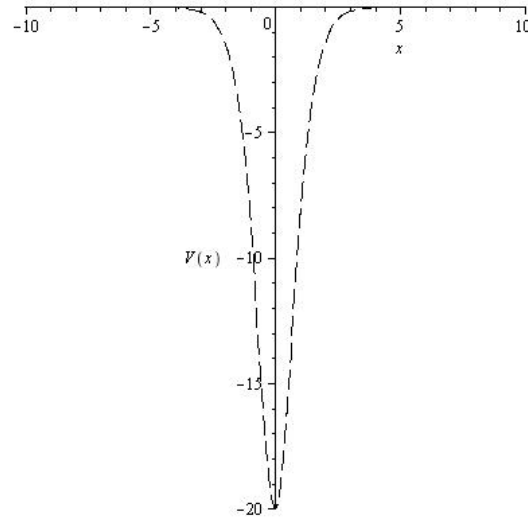


Figura 1: Gráfico ilustrativo do potencial de Rosen-Morse simétrico (2.3.1) com $U_0 = 20$ e $\alpha = 1$.

Utilizando a soma de probabilidades (2.3.11) e considerando as constantes $U_0 = 20$, $Q = 4$ e $\alpha = 1$ foram construídos os gráficos de $P(x,t)$ versus posição x para diferentes valores de tempo (t) mostrados nas figuras 3 e 4 com linhas contínuas.

As curvas estão sobrepostas à distribuição de probabilidade obtida através da solução numérica da EFP (1) com a função $f(x)$ dada por (2.3.2). O método numérico utilizado se baseia no método de diferenças finitas [21] (vide capítulo 6) e é representado pelas linhas tracejadas. A constante de difusão Q foi mantida igual a 4 e a discretização em x e t foram, respectivamente, $h = 2 \cdot 10^{-3}$ e $k = 2 \cdot 10^{-5}$. A solução numérica segue o procedimento indicado em [21] adaptado para a EFP linear que é tratada nesse trabalho.

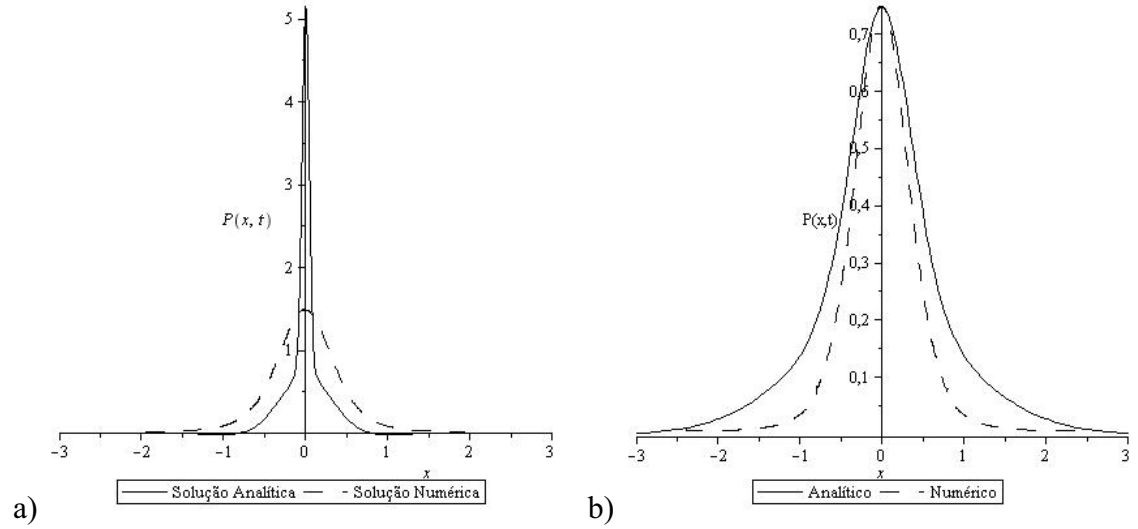


Figura 2: Gráfico comparativo entre a distribuição de probabilidade (2.3.1) e resultados numéricos para a) $t = 10^{-3}$ e b) $t = 0.5$.

Como esperado, a figura 2a mostra que $P(x, t)$ para tempos pequenos, da ordem de 10^{-3} unidades de tempo, se assemelha a uma função delta, isto é, há uma grande concentração na região central do poço. Isso é resultado direto da condição inicial usada, $P(x, 0) = \delta(x)$. Conforme aumentamos t , este pico se reduz e fica mais largo ao redor da posição central ($x = 0$), até atingir o estado estacionário. Como pode ser mostrado na figura 3, para tempos superiores a 3 unidades de tempo o sistema já pode ser considerado como estando no estado estacionário.

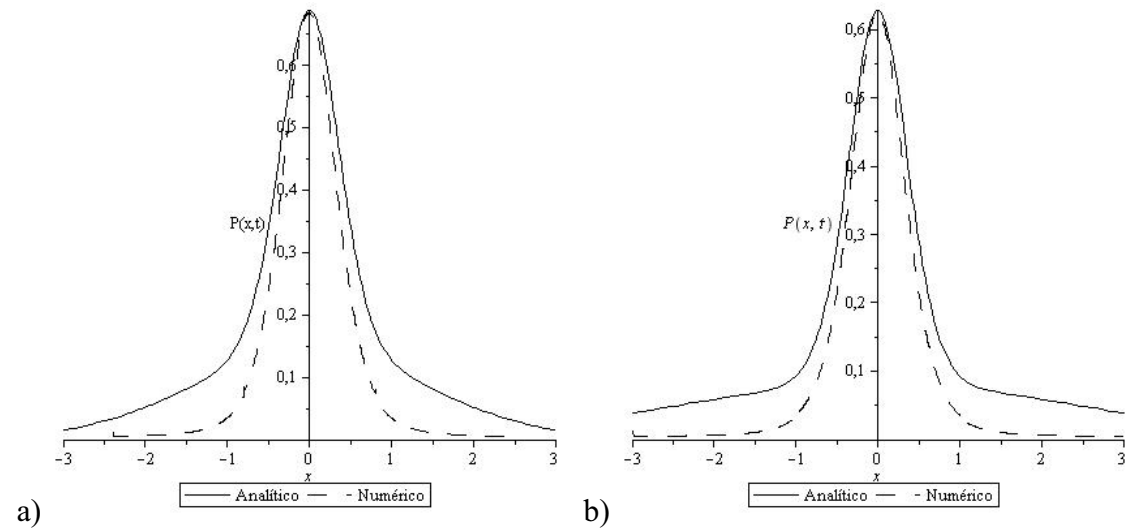


Figura 3: Gráfico comparativo entre a distribuição de probabilidade (2.3.11) e resultados numéricos para a) $t = 1$ e b) $t = 3$.

Comparando a evolução temporal obtida numericamente com a equação (2.3.11) figuras 2 e 3, vemos que a solução analítica aproximada apresenta um decaimento de probabilidade maior que o método numérico. Para tempos intermediários ($0.1 < t < 1$) e longos ($t > 1$) é observada uma boa aproximação dos resultados na região central, $x = 0$, que corresponde à posição de maior probabilidade. Com tempos muito pequenos observa-se que o resultado numérico converge muito lentamente para a configuração dada pela condição inicial.

Como esperado a introdução dos estados livres leva a um aumento das probabilidades nas regiões mais afetadas do centro do poço. O resultado numérico apresenta valores menores nessas regiões, isso parece ser resultado da limitação do método numérico, pois nessas regiões a probabilidade pequena favorece o acúmulo de erros numéricos.

2.4. Potencial “Harmônico” Finito

Assumindo agora um modelo onde a força $f(x)$ é dada pela expressão,

$$f(x) = \begin{cases} -kx & -d \leq x \leq d \\ -kd & -d \geq x \text{ e } x \geq d \end{cases} \quad (2.4.1)$$

onde k é uma constante e d é um fator espacial que limita a ação da força. Nessas condições, a equação (2.2.3) na região do poço de potencial ($-d \leq x \leq d$) é representada como,

$$\lambda_l \Psi_l = -\frac{1}{2} \left\{ -k + \frac{k^2 x^2}{2Q} \right\} \Psi_l + Q \frac{d^2}{dx^2} \Psi_l. \quad (2.4.2)$$

Essa equação é análoga à equação de Schroedinger para o oscilador harmônico, cuja solução pode ser encontrada, por exemplo, na referência [26] e é dada por,

$$\Psi_l(x) = \left(\frac{1}{2^l l!} \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \right)^{1/2} e^{-\alpha x^2/2} H_l(\sqrt{\alpha} x), \quad (2.4.2)$$

onde H_l são os polinômios de Hermite e os autovalores λ_l são calculados por $-kl$, tal que, $l = 0, \dots, \infty$. Desta forma, seguindo o método utilizando as relações (2.2.6), (2.2.8) e (2.2.17) temos que a distribuição de probabilidade $P(x, t)$ é definida como sendo,

$$P(x, t) = \sum_{l=0}^N \left(\frac{1}{2^l l!} \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \right) e^{-\alpha x^2} H_l(\sqrt{\alpha} x) H_l(0) e^{-t|\lambda_l|} + \frac{1}{2\sqrt{Q\pi t}} e^{-x^2/t \cdot Q}. \quad (2.4.3)$$

Com os termos da série correspondendo a contribuição dos termos discretos da distribuição de probabilidade, dentro da região de poço de potencial, e a gaussiana corresponde à região acima da ação do potencial. Como ilustração os parâmetros k e d são fixados, $k = 0.75$ e $d = 2$, a figura 4 ilustra o potencial que emerge da equação tipo Schroedinger (2.2.5) para um poço com esses parâmetros. Nesse caso, há apenas o estado fundamental e mais dois autovalores excitados dentro da região de confinamento.

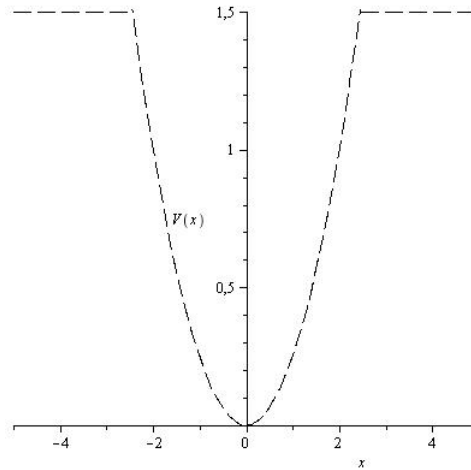


Figura 4: Gráfico ilustrativo do potencial harmônico finito com constante elástica (k) igual a 0.75 e $d = 2$.

A figura 5 mostra a distribuição de probabilidade obtida pela equação (2.4.3) para diferentes valores de t . Devido às características desse exemplo, tem-se $N = 2$, ou seja, existem três estados discretos dentro do poço.

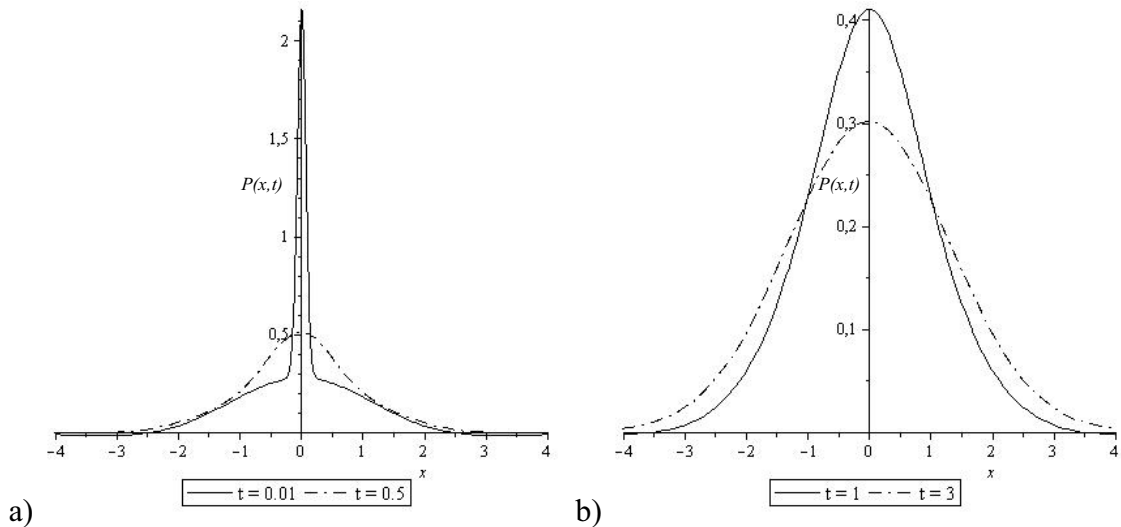


Figura 5: Gráfico da distribuição de probabilidade (2.4.3) a) tempos pequenos e b) tempos grandes, com parâmetros $Q = 4$, $k = 0,75$.

Da mesma forma que observado anteriormente, para tempos muito pequenos $P(x,t)$ se aproxima da função δ (condição inicial). Conforme o tempo aumenta a curva se torna mais suave indicando que as partículas estão se difundindo pelo meio ao redor de $x = 0$.

A partir de $t = 3$, a distribuição $P(x,t)$ não se altera com o tempo indicando que o sistema atingiu o estado estacionário. Para valores grandes de tempo, a função gaussiana passa a ter uma contribuição pequena na probabilidade total. Como esperado, a solução estacionária continua sendo expressa pelo primeiro termo da solução em série apresentada (2.2.3).

3. Métodos de Solução

A obtenção de uma solução analítica da equação de Fokker-Planck não linear, na literatura é encontrada para poucos casos [18]. Isto ocorre devido ao termo não linear da equação que impede a aplicação de métodos de solução comuns para equações diferenciais parciais, como por exemplo, o método de separação de variáveis, onde se escreve a distribuição de probabilidades como sendo um produto de duas funções a serem definidas e que dependem apenas de uma única variável distinta.

Os métodos de solução passam a ser restritos a três tipos:

- 1-) Solução estacionária [28];
- 2-) Solução analítica utilizando *ansatz* [29, 30];
- 3-) Métodos numéricos de solução [16, 31 - 32].

3.1. Solução estacionária

A solução estacionária da equação de Fokker-Planck é independente da variável t e, portanto não permite o estudo da evolução da distribuição de probabilidade em determinado período. Para obtê-la, a equação (1.3) deve ser escrita através de uma corrente de probabilidade $J(x,t)$, como representado abaixo:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} J(x,t), \quad (3.1.1)$$

sendo $J(x,t) = -P(x,t) \cdot f(x) + Q \frac{\partial}{\partial x} P(x,t)^v$.

A equação de FPNL expressa na forma (3.1.1) é uma equação de continuidade, se integrarmos ambos os lados dentro de um intervalo $[a,b]$, tal que, $x \in [a,b]$, obtemos

$$\int_a^b \frac{\partial P(x,t)}{\partial t} dx = -\int_a^b \frac{\partial}{\partial x} J(x,t) \cdot dx, \quad (3.1.2)$$

ou seja,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_a^b P(x,t) \cdot dx = J(a,t) - J(b,t), \quad (3.1.3)$$

mas a densidade de probabilidade do lado esquerdo deve estar normalizada para qualquer instante, isto é, a integral de $P(x,t)$ para o intervalo $[a,b]$ é igual a 1. Logo o lado esquerdo da equação (3.1.3) deve se anular, o que permite estabelecer a seguinte condição de contorno: $J(a,t) = J(b,t)$.

No regime estacionário, a densidade de probabilidade será independente de t , de modo que a corrente de probabilidade também será independente de t . Como o lado esquerdo da equação (3.1.1) se anula, então a corrente de probabilidade será também independente de x ($J(x,t) = \text{constante}$). Assim, ela deve ter o mesmo valor qualquer que seja x , porém como ela é nula nos extremos do intervalo, então ela é nula em todo o intervalo. Portanto, temos que

$$-P(x,t) \cdot f(x) + Q \frac{\partial}{\partial x} P(x,t)^v = 0. \quad (3.1.4)$$

A equação acima é uma equação diferencial ordinária (E.D.O.) não linear, de primeira ordem cuja solução pode ser encontrada isolando a derivada espacial:

$$\frac{1}{P(x)} \frac{d}{dx} [P(x)]^v = \frac{f(x)}{Q}. \quad (3.1.5)$$

O lado esquerdo da equação (3.1.5) pode ser reescrito como,

$$\frac{v}{v-1} \frac{d}{dx} [P(x)]^{v-1} = \frac{f(x)}{Q}, \quad (3.1.6)$$

e integrando os dois membros com respeito a variável x obtemos,

$$[P(x)]^{v-1} - A = \frac{(v-1)}{v} \int \frac{f(x)}{Q} dx, \quad (3.1.7)$$

onde A é uma constante de integração.

A integral de determinada força $f(x)$ pode ser relacionada a um potencial $V(x)$. Desta forma, a equação (3.1.7) pode ser escrita como

$$P(x)^{v-1} = A - \frac{(v-1)}{vQ} V(x), \quad (3.1.8)$$

ou seja,

$$P(x) = \left(A - \frac{(v-1)}{vQ} V(x) \right)^{1/(v-1)}. \quad (3.1.9)$$

Assim, a solução da equação independente do tempo $P(x)$ é dada a menos de uma constante (A) que pode ser determinada a partir da normalização desta função. Esta

solução é estável e interpretada como um atrator do sistema, isto é, independente da posição o sistema tenderá a esta distribuição após certo intervalo de tempo (Δt).

3.2. Solução temporal

A resolução da EFPNL, devido ao termo não-linear presente na derivada de segunda ordem, torna-se complicada na presença de uma dada função $f(x)$. Na literatura, soluções explícitas para a equação (1.3) existem para um número restrito de problemas e se baseiam na aplicação de um *ansatz*.

Desta maneira, nós consideramos que $P(x,t)$ é descrito por uma função específica de x e t que substituímos diretamente na equação de Fokker-Planck. Então após algumas manipulações torna-se possível definir estas funções que compõem o *ansatz* adotado.

Os sistemas que permitem encontrar uma solução com dependência tanto espacial quanto temporal são segundo [18, 29, 30]:

- a) $f(x) = 0$;
- b) $f(x) = \text{constante}$;
- c) $f(x) \propto x$;
- d) $f(x) = a \cdot x - b \cdot x^\theta$.

Para os três primeiros casos acima, o *ansatz* é uma função do tipo $P(x,t) = D(t)Z(x,t)^{1/(1-q)}$, onde a função $Z(x,t)$ é dada como: $1 - (1-q)\beta(t)x^2$, onde $\beta(t)$ é uma função dependente apenas de t e $q = 2 - \nu$, tal que, $q \geq 0$. A distribuição de probabilidade foi escolhida desta forma, porque esta expressão maximiza a entropia de Tsallis, da mesma forma que uma distribuição gaussiana maximiza a entropia de Gibbs-Boltzmann.

Isto permite representar $P(x,t)$ como sendo igual a $e_q^{-\beta(t)x^2}$. Esta representação recebe a denominação de uma função q -gaussiana. Quando se faz o limite de $q \rightarrow 1$ na probabilidade, voltamos ao regime extensivo e o *ansatz* fornece uma função gaussiana.

Para o quarto sistema é necessário fazer uma consideração a mais na equação de Fokker-Planck. Neste caso, é suposto que o coeficiente de difusão tenha uma dependência espacial e esteja relacionado à função $f(x)$, tal que, $Q \rightarrow Q'(x) = Q x^{-\alpha}$ sendo α uma constante a ser determinada na resolução do problema e Q a constante de

difusão. O *ansatz* é dado pela expressão: $P(x,t) = \phi(t)^{-1} u(x/\phi(t))$, onde u é a nova função a ser definida através de (1.3).

A resolução dos modelos apresentados acima segue no próximo capítulo.

3.3. Método Numérico

O último método trabalhado para a resolução da equação de Fokker-Planck utiliza recursos computacionais. Ele é baseado no método de diferenças finitas e consiste em particionar o espaço contínuo em x e t ($(x,t) \in \mathbb{R}^2$) criando uma malha, onde os pontos para cada novo valor de tempo são definidos por uma média [32]. A figura 6 representa uma malha discretizada.

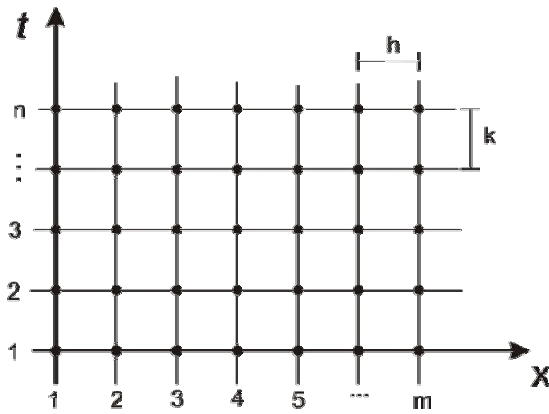


Figura 6: Modelo de malha de uma equação diferencial fracionada.

A primeira linha (t igual a 1) representa o instante inicial do sistema. As constantes i e j , representam o espaçamento da malha, enquanto h e k definem o tamanho dela. O tempo e espaço são dados como:

$$\begin{aligned} t &= jk & j &= 0, 1, 2, \dots, n \\ x &= x_0 + ih & i &= 0, 1, 2, \dots, m \end{aligned} \quad (3.3.1)$$

onde x_0 é a posição inicial e x a posição final da malha. Para dividirmos o domínio da equação diferencial, o primeiro passo é expandir em série de Taylor determinada função $f(x)$ na vizinhança de $x+h$. Assim,

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!} f''(x) + \dots + \frac{h^n}{n!} f^n(x). \quad (3.3.2)$$

O último termo da série (3.3.2) corresponde ao erro de aproximação usada. Considerando os três primeiros termos da série, a primeira derivada é dada como,

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{h}{2!} f''(x). \quad (3.3.3)$$

A fórmula acima (3.3.3) é denominada como discretização avançada e o erro corresponde ao ultimo termo do lado direito da igualdade sendo da ordem de h . Se tivéssemos considerado a expansão ao redor de $x - h$ a expressão é semelhante a (3.3.3),

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} - \frac{h}{2!} f''(x), \quad (3.3.4)$$

A equação (3.3.4) apresenta também um erro da ordem de h e é conhecida como diferença atrasada.

Um último modelo de representação é chamado de diferença centrada, para obtê-lo, vamos considerar as duas expansões de $f(x)$:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!} f''(x) + \frac{h^3}{3!} f'''(x) \quad (3.3.5)$$

e

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!} f''(x) - \frac{h^3}{3!} f'''(x). \quad (3.3.6)$$

Subtraindo (3.3.5) de (3.3.6), temos que,

$$f(x+h) - f(x-h) = 2hf'(x) + \frac{h^3}{3!} f'''(x) \quad (3.3.7)$$

e isolando a derivada de primeira ordem de (3.3.7), obtemos,

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{3!} f'''(x). \quad (3.3.8)$$

Como podemos ver o erro agora é da ordem de h^2 , bem menor garantindo uma precisão e proximidade maior dos resultados numéricos com os analíticos. Estas equações fornecem uma aproximação para derivadas de primeira ordem, derivadas de segunda ordem são dadas apenas de uma forma, obtida das relações acima (3.3.5) e (3.3.6):

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} \quad (3.3.9)$$

Utilizando o método implícito ou avançado, os termos da equação de Fokker-Planck não linear (1.3) são dados como:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} \approx \frac{P_{i,j+1} - P_{i,j}}{k}, \quad (3.3.10)$$

e

$$\frac{\partial}{\partial x} [P(x,t)f(x)] \approx P_{i,j} \frac{df(x)}{dx} + f(x) \frac{P_{i+1,j} - P_{i,j}}{h}, \quad (3.3.11)$$

onde i e j correspondem, respectivamente, a x e t .

O termo não linear é descrito seguindo o modelo proposto por Richtmyer [32]. Para facilitar a explicação vamos considerar a seguinte derivada de segunda ordem:

$$\frac{\partial^2 [u(x,t)]^m}{\partial x^2} \approx \frac{\theta \delta_x^2 (u_{i,j+1}^m) + (1-\theta) \delta_x^2 (u_{i,j}^m)}{h^2}, \quad (3.3.12)$$

onde m é um número inteiro qualquer maior ou igual a 2, θ é um peso de valor entre zero e um que influencia na forma da discretização e δ^2 representa a derivada ainda não discretizada. Se seu valor for 0 então obtemos um esquema de discretização explícito dado pela expressão (3.3.3) e é instável para grandes valores de iteração. Se for igual a 1 o método é incondicionalmente estável, mas representa um esquema implícito de evolução (3.3.4) que consome um tempo computacional maior. Entretanto, o valor de θ igual a 0,5 é conhecido como de Crank-Nicolson, que é incondicionalmente estável no tempo e exige um esforço computacional menor que o implícito.

A função $u_{i,j+1}^m$ pode ser expandida em série de Taylor ao redor de t , desta forma,

$$u_{i,j+1}^m \approx u_{i,j}^m + k \frac{\partial u_{i,j}^m}{\partial t} + \dots = u_{i,j}^m + km u_{i,j}^{m-1} \frac{\partial u_{i,j}}{\partial t} + \dots, \quad (3.3.13)$$

ou ainda,

$$u_{i,j+1}^m \approx u_{i,j}^m + mu_{i,j}^{m-1} (u_{i,j+1} - u_{i,j}). \quad (3.3.14)$$

Usando a relação (2.3.14), o termo não linear da equação de Fokker-Planck fica:

$$P_{i,j+1}^\nu \approx P_{i,j}^\nu + \nu \cdot P_{i,j}^{\nu-1} (P_{i,j+1} - P_{i,j}). \quad (3.3.15)$$

A fim de facilitar a notação e os cálculos, vamos considerar a diferença $P_{i,j+1} - P_{i,j}$, como sendo igual a w_i . Substituindo esta relação em (3.3.12), a derivada segunda é escrita como:

$$\frac{\partial^2 P(x,t)^\nu}{\partial x^2} = \frac{\theta \delta_x^2 (P_{i,j}^\nu + \nu P_{i,j}^{\nu-1} w_i) + (1-\theta) \delta_x^2 (P_{i,j}^\nu)}{h^2}, \quad (3.3.16)$$

ou ainda, discretizando as duas derivadas implícitas (δ^2) em x obtemos:

$$\frac{\partial^2 P(x,t)^\nu}{\partial x^2} = \frac{\nu \theta (P_{i-1,j}^{\nu-1} w_{i-1} - 2P_{i,j}^{\nu-1} w_i + P_{i+1,j}^{\nu-1} w_{i+1})}{h^2} + \frac{(P_{i-1,j}^\nu - 2P_{i,j}^\nu + P_{i+1,j}^\nu)}{h^2}. \quad (3.3.17)$$

Juntando as expressões (3.3.10), (3.3.11) e (3.3.16), mantendo a notação de w_i , encontramos a equação de Fokker-Planck não linear na forma discretizada:

$$w_i = -kP_{i,j} \frac{df(x)}{dx} - kf(x) \frac{P_{i+1,j} - P_{i,j}}{h} + Qk \left[\frac{\nu\theta(P_{i-1,j}^{\nu-1} w_{i-1} - 2P_{i,j}^{\nu-1} w_i + P_{i+1,j}^{\nu-1} w_{i+1})}{h^2} + \frac{(P_{i-1,j}^{\nu} - 2P_{i,j}^{\nu} + P_{i+1,j}^{\nu})}{h^2} \right] \quad (3.3.18)$$

Rearranjando os termos de (3.3.18) e separando em um lado da igualdade aqueles que apresentem uma dependência em relação à w_i , temos que,

$$\begin{aligned} & -\nu\theta QrP_{i-1,j}^{\nu-1} w_{i-1} + (1 + 2\nu\theta QrP_{i,j}^{\nu-1}) w_i - \nu\theta QrP_{i+1,j}^{\nu-1} w_{i+1} = \\ & = -\left(rh^2 \frac{df(x)}{dx} - rhf(x) + 2QrP_{i,j}^{\nu-1} \right) P_{i,j} - \left(rhf(x) - QrP_{i+1,j}^{\nu-1} \right) P_{i+1,j} + QrP_{i-1,j}^{\nu}, \end{aligned} \quad (3.3.19)$$

sendo $r = k/h^2$.

O valor da probabilidade em um segundo instante de tempo é definido pela diferença $P_{i,j+1} = w_i + P_{i,j}$. O valor de $P_{i,j}$ corresponde aos pontos iniciais da malha (figura 6) definidos a partir da solução estacionária de probabilidades (3.1.9), já w_i é encontrado solucionando (3.3.19), uma vez que todos os valores são conhecidos.

4. Soluções Explícitas

Três modelos foram escolhidos para o estudo das soluções matemáticas da equação de Fokker-Planck não linear, são eles a partícula em uma caixa, o oscilador harmônico e o potencial com barreira.

4.1. Partícula Confinada

O primeiro modelo que vamos considerar corresponde a uma partícula livre (na ausência de forças externas) confinada em uma região de $-L/2 \leq x \leq L/2$, como mostra a figura 7:

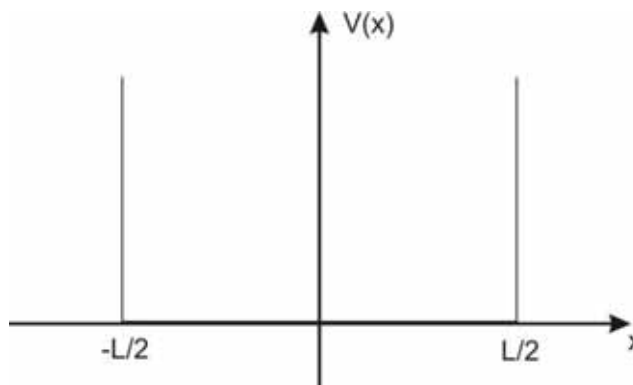


Figura 7: Região de confinamento da partícula ($-L/2 \leq x \leq L/2$).

Se uma partícula possui uma energia menor que a barreira de potencial $V(x)$, ela está confinada dentro do poço e fica oscilando entre os extremos da região. Segundo a mecânica quântica, apenas certos valores da energia total separados discretamente são possíveis. Este modelo é muito utilizado para representar partículas se movendo em uma região limitada no espaço sob a influência de forças que a mantêm nesta região.

Um exemplo deste sistema é o potencial que atua sobre um elétron de condução em um bloco de metal por meio de um poço quadrado ou moléculas gasosas que estão obrigatoriamente confinadas em certa região.

A equação de Fokker-Planck obtida neste caso é escrita da seguinte maneira:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = Q \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x,t)^\nu. \quad (4.1.1)$$

Como a força é nula, a derivada de primeira ordem também se anula restando apenas os termos acima. A equação diferencial parcial (4.1.1) obtida é de segunda ordem e a solução é dada pelo *ansatz* em [8], pág.19:

$$P(x,t) = D(t) \left\{ 1 - \beta(t)(\nu - 1)x^2 \right\}^{1/\nu-1}, \quad (4.1.2)$$

ou ainda,

$$P(x,t) = D(t)Z(x,t)^{1/\nu-1}. \quad (4.1.3)$$

Sendo $D(t)$ e $\beta(t)$ duas funções temporais a serem definidas de acordo com o problema proposto. Como já mencionado, a importância da solução ter esta forma é que ela maximiza a termodinâmica não-extensiva introduzida por Tsallis. Substituindo esta expressão na equação (4.1.1) e rearranjando os termos obtemos a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} Z(x,t)^{1/\nu-1} \left\{ \frac{dD(t)}{dt} - QD(t)^\nu \left(\frac{\nu}{\nu-1} \right) \frac{\partial^2 Z(x,t)}{\partial x^2} \right\} + \\ + \frac{Z(x,t)^{2-\nu/\nu-1}}{\nu-1} \left\{ D(t) \frac{\partial Z(x,t)}{\partial t} - QD(t)^\nu \left(\frac{\nu}{\nu-1} \right) \left(\frac{\partial Z(x,t)}{\partial x} \right)^2 \right\} = 0. \end{aligned} \quad (4.1.4)$$

Para que esta igualdade seja satisfeita, assumimos a condição de que os termos dentro das chaves se anulem. Logo, utilizando a definição $Z(x,t) = 1 - \beta(t)(1-q)x^2$ conseguimos montar o seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias:

$$\begin{cases} \frac{dD(t)}{dt} + 2Q\nu\beta(t)D(t)^\nu = 0 & i) \\ D(t)x^2 \frac{d\beta(t)}{dt} - 4Q\nu\beta(t)^2 D(t)^\nu x^2 = 0 & ii) \end{cases} \quad (4.1.5)$$

A equação *ii)* permite colocar o termo x^2 em evidência, e desta maneira, a igualdade só pode ser atendida se $x = 0$ ou se os termos multiplicados por x se anulem. Logo,

$$\begin{cases} \frac{dD(t)}{dt} + 2Q\nu\beta(t)D(t)^\nu = 0 & i) \\ D(t) \frac{d\beta(t)}{dt} - 4Q\nu\beta(t)^2 D(t)^\nu = 0 & ii) \end{cases} \quad (4.1.6)$$

Em *i)* e *ii)* da equação (4.1.6) há um termo em comum correspondente a $2Q\nu\beta(t)D(t)^\nu$. Isolando este termo na relação *i)* e substituindo em *ii)* chegamos a seguinte equação diferencial:

$$D(t) \frac{d\beta(t)}{dt} - 2\beta(t) \frac{dD(t)}{dt} = 0. \quad (4.1.7)$$

Dividindo a equação por $\beta(t)D(t)$ e rearranjando os termos temos:

$$\frac{1}{\beta(t)} \frac{d\beta(t)}{dt} = \frac{2}{D(t)} \frac{dD(t)}{dt}. \quad (4.1.8)$$

Integrando ambos os lados da igualdade, vemos que a função β é diretamente proporcional a $D(t)^2$:

$$\beta(t) = \beta_0 \cdot \left(\frac{D(t)}{D_0} \right)^2, \quad (4.1.9)$$

sendo β_0 e D_0 duas constantes a serem definidas. De acordo com esta relação vemos que definindo a função $D(t)$ automaticamente obtemos o valor de $\beta(t)$. Para fazer isto substituímos (4.1.9) em *i*) para obter uma equação diferencial ordinária apenas dependente da função $D(t)$, sem haver termos cruzados.

$$\frac{dD(t)}{dt} + 2Q\nu \frac{\beta_0}{D_0} D(t)^{\nu+2} = 0, \quad (4.1.10)$$

ou ainda,

$$\frac{-1}{\nu+1} \frac{dD(t)^{-(\nu+1)}}{dt} = -2Q\nu \frac{\beta_0}{D_0}. \quad (4.1.11)$$

A solução de (4.1.11) é facilmente obtida integrando ambos os lados da igualdade, de maneira que,

$$D(t) = \left\{ D_0^{-(\nu+1)} + 2(\nu+1)Q\nu \frac{\beta_0}{D_0} t \right\}^{-\frac{1}{\nu+1}}. \quad (4.1.12)$$

Para definir a constante D_0 , vamos considerar a condição que para um tempo inicial ($t = 0$) e na posição central ($x = 0$), a probabilidade tenha que ser máxima. Isto implica que $D(t = 0)$ tem que ser igual a 1, assim,

$$D(t = 0) = \left\{ D_0^{-(\nu+1)} + 0 \right\}^{-\frac{1}{\nu+1}} = 1. \quad (4.1.13)$$

Portanto a constante D_0 possui valor 1. A função $\beta(t)$ fica, então,

$$\beta(t) = \beta_0 \left\{ 1 + 2(\nu+1)Q\nu\beta_0 t \right\}^{-\frac{2}{\nu+1}}. \quad (4.1.14)$$

Desta forma, a solução da equação de Fokker-Planck não linear (4.1.1) é dada pelo *ansatz* (4.1.2) com $D(t)$ e $\beta(t)$ dadas, respectivamente, pelas equações (4.1.12) e (4.1.14) como pode ser visto em [13].

4.2. Potencial Harmônico

O potencial harmônico é utilizado na descrição de sistemas em que há pequenas oscilações em torno do ponto de equilíbrio. Estes sistemas podem ser desde vibrações atômicas em sólidos devido a propriedades térmicas e acústicas ou vibrações de átomos em moléculas diatômicas.

Este potencial é dado por uma força $f(x) = -kx$, em que k é a constante elástica do oscilador. A solução estacionária para este potencial é dada como:

$$P(x) = A^{1/(\nu-1)} \left(1 - \frac{(\nu-1)}{\nu Q A} k x^2 \right)^{1/(\nu-1)}. \quad (4.2.1)$$

Da mesma maneira como foi mostrado no item anterior, o procedimento para obter uma solução dependente do tempo para a EFPNL se dá substituindo o *ansatz* (4.1.2) na equação (1.3) de forma que obtemos um sistema de duas equações, tal que,

$$\begin{cases} \frac{dD(t)}{dt} + D(t) \frac{df(x)}{dx} - QD(t)^\nu \left(\frac{\nu}{\nu-1} \right) \frac{\partial^2 Z(x,t)}{\partial x^2} = 0 \\ D(t) \frac{\partial Z(x,t)}{\partial t} + D(t) f(x) \frac{\partial Z(x,t)}{\partial x} - QD(t)^\nu \left(\frac{\nu}{\nu-1} \right) \left(\frac{\partial Z(x,t)}{\partial x} \right)^2 = 0 \end{cases} \quad (4.2.2)$$

A diferença da solução deste problema para o do item anterior é a presença de $f(x)$, que vai alterar as funções $D(t)$ e $\beta(t)$. Substituindo $f(x)$ e $Z(x,t) = 1 - \beta(t)(\nu-1)x^2$, no sistema acima, temos:

$$\begin{cases} \frac{dD(t)}{dt} - D(t)k + 2Q\nu\beta(t)D(t)^\nu = 0 & i) \\ D(t)x^2 \frac{d\beta(t)}{dt} + D(t)k2\beta(t)x^2 - 4Q\nu\beta(t)^2 D(t)^\nu x^2 = 0 & ii) \end{cases} \quad (4.2.3)$$

A equação *ii)* permite colocar o termo x^2 em evidência, e desta maneira, a igualdade só pode ser atendida se $x = 0$ ou se os termos multiplicados por x se anularem, como no caso anterior. Assim,

$$\begin{cases} \frac{dD(t)}{dt} - D(t)k + 2Q\nu\beta(t)D(t)^\nu = 0 \\ D(t) \frac{d\beta(t)}{dt} + k2\nu D(t)\beta(t) - 4\nu Q\beta(t)^2 D(t)^\nu = 0 \end{cases} \quad (4.2.4)$$

Ambas as equações do sistema dado por (4.2.4) possuem um termo em comum: $2Q\nu\beta(t)D(t)^\nu$; que pode ser colocado em evidência em *i)* e, assim, obtém-se

$$2\nu Q\beta(t)D(t)^\nu = -\frac{dD(t)}{dt} + D(t)k. \quad (4.2.5)$$

Substituindo (4.2.5) na equação *ii*), novamente encontramos a mesma relação entre $D(t)$ e $\beta(t)$ obtida para o caso do poço quadrado

$$D(t) \cdot \frac{d\beta(t)}{dt} - 2\beta(t) \frac{dD(t)}{dt} = 0. \quad (4.2.6)$$

Da mesma forma que foi feito no tópico anterior, integramos (4.2.6) e encontramos que $\beta(t)$ é diretamente proporcional a $D(t)^2$ (4.1.9). Substituindo esta relação na equação *i*), eliminamos os termos cruzados e conseguimos uma equação diferencial dependente apenas da função $D(t)$:

$$\frac{dD(t)}{dt} - D(t)k + \frac{2Q\nu\beta_0}{D_0^2} D(t)^{\nu+2} = 0. \quad (4.2.7)$$

O primeiro passo adotado para solucionar a equação acima é reescrevê-la como:

$$\frac{-1}{\nu+1} \frac{dD(t)^{-(\nu+1)}}{dt} - D(t)^{-(\nu+1)} k + \frac{2Q\nu\beta_0}{D_0^2} = 0, \quad (4.2.8)$$

para facilitar a notação, chamamos $T(t) = D(t)^{-(\nu+1)}$. Assim,

$$\frac{-1}{\nu+1} \frac{dT(t)}{dt} - T(t)k + \frac{2Q\nu\beta_0}{D_0^2} = 0. \quad (4.2.9)$$

A solução para (4.2.9) é dada como:

$$T(t) = \frac{2Q\nu\beta_0}{kD_0^2} + Ne^{-bt}, \quad (4.2.10)$$

sendo b e N duas constantes a serem definidas. O valor da constante b pode ser facilmente obtido substituindo (4.2.10) em (4.2.9):

$$\frac{b}{\nu+1} Ne^{-bt} - \left\{ \frac{2Q\nu\beta_0}{kD_0^2} + Ne^{-bt} \right\} k + \frac{2Q\nu\beta_0}{D_0^2} = 0, \quad (4.2.11)$$

isto é,

$$\frac{b}{\nu+1} Ne^{-bt} - Nke^{-bt} = 0. \quad (4.2.12)$$

A igualdade acima só é satisfeita se b é igual a $k(\nu+1)$. Portanto, a função de $D(t)$ é definida como:

$$D(t) = \left\{ \frac{2Q\nu\beta_0}{kD_0^2} + Ne^{-k(\nu+1)t} \right\}^{\frac{1}{\nu+1}}. \quad (4.2.13)$$

Vamos definir a constante de normalização $A^{1/\nu-1}$ (pág. 27) da solução estacionária. Para isso, assumimos que para um tempo grande ($t \rightarrow \infty$) e na posição

central ($x = 0$), a probabilidade tenha que ser máxima e igual à estacionária (4.2.1). Isto implica que $D(t \rightarrow \infty)$ tem que ser igual à $A^{1/\nu-1}$, assim,

$$D(t \rightarrow \infty) = \left\{ \frac{2Q\nu\beta_0}{kD_0^2} \right\}^{-1/(\nu+1)} = A^{1/\nu-1}, \quad (4.2.14)$$

ou seja, a constante de normalização tem que ser igual a,

$$A = \left(\frac{kD_0^2}{2Q\nu\beta_0} \right)^{(\nu-1)/(\nu+1)}. \quad (4.2.15)$$

Para definir a constante N da função $D(t)$, vamos considerar que no instante inicial ($t = 0$), a distribuição de probabilidade em $x = 0$ tem que ser máxima e igual a 1, desta forma,

$$D(t = 0) = \left\{ \frac{2Q\nu\beta_0}{kD_0^2} + N \right\}^{-1/(\nu+1)} = 1, \quad (4.2.16)$$

rearranjando (4.2.16), temos que,

$$N = 1 - \frac{2Q\nu\beta_0}{kD_0^2}. \quad (4.2.17)$$

Portanto,

$$D(t) = \left\{ \frac{2Q\nu\beta_0}{kD_0^2} + \left(1 - \frac{2Q\nu\beta_0}{kD_0^2} \right) e^{-k \cdot (\nu+1)t} \right\}^{\frac{1}{\nu+1}}. \quad (4.2.18)$$

Por fim, a função $\beta(t)$ fica como:

$$\beta(t) = \frac{\beta_0}{D_0^2} \left\{ \frac{2Q\nu\beta_0}{kD_0^2} + \left(1 - \frac{2Q\nu\beta_0}{kD_0^2} \right) e^{-k \cdot (\nu+1)t} \right\}^{\frac{2}{\nu+1}}. \quad (4.2.19)$$

Ao contrário do caso de uma partícula confinada, a dependência temporal aqui é proporcional a exponencial decrescente. As constantes β_0 e D_0^2 podem ser definidas a partir da relação (4.2.15) e utilizando a definição de $\beta(t)$ (4.2.19) quando $t \rightarrow \infty$.

Portanto, a solução encontrada para o oscilador harmônico é:

$$P(x, t) = \left\{ \frac{2Q\nu\beta_0}{kD_0^2} + \left(1 - \frac{2Q\nu\beta_0}{kD_0^2} \right) e^{-k \cdot (\nu+1)t} \right\}^{\frac{1}{\nu+1}} \left\{ 1 - (\nu-1)x^2 \cdot \frac{\beta_0}{D_0^2} \left\{ \frac{2Q\nu\beta_0}{kD_0^2} + \left(1 - \frac{2Q\nu\beta_0}{kD_0^2} \right) e^{-k \cdot (\nu+1)t} \right\}^{\frac{2}{\nu+1}} \right\}^{1/\nu-1}. \quad (4.2.20)$$

4.3. Potencial com Barreira

Como último exemplo de solução explícita para a EFPNL, vamos considerar o modelo harmônico com uma perturbação da ordem de x^3 que cria uma pequena curvatura ou barreira em determinada região, conforme indicado na figura 8.

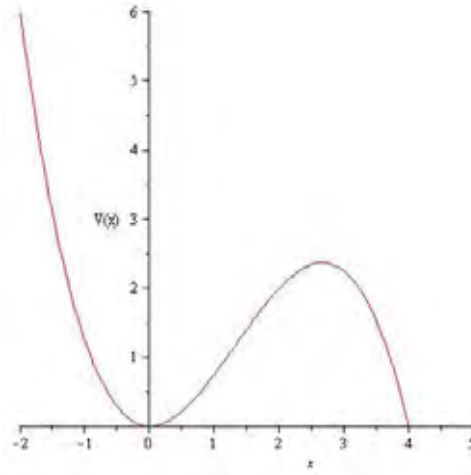


Figura 8: Gráfico representativo do potencial com barreira dado por (4.3.1).

O potencial $v(x)$ que descreve comportamento semelhante ao da curva acima é dado por:

$$v(x) = k_1 x^2 - k_2 x^3, \quad (4.3.1)$$

onde k_1 e k_2 são duas constantes definidas de acordo com o sistema analisado. Para a construção da figura 8 os valores utilizados para as constantes foram respectivamente, de 1 e 0,25.

Um grande número de fenômenos podem ser relacionados a processos cinéticos, este é o caso, por exemplo, de reações eletroquímicas em metais ou em membranas onde os átomos ou partículas que estão interagindo na interface entre os ambientes, *bulk* e o interior do material. Esta diferença entre os ambientes em vários casos leva a um processo de difusão em que partículas de um meio são absorvidas para dentro da estrutura. Esta absorção pode ocorrer em uma taxa constante ou em alguns casos, tem uma dependência temporal [33].

Para obtermos uma solução da equação de Fokker-Planck neste caso, foi necessário acrescentar um termo a mais em (1.3) como está apresentado a seguir:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [f(x)P(x,t)] + Q \frac{\partial^2 [P(x,t)]^v}{\partial x^2} - \mu(t)P(x,t). \quad (4.3.2)$$

A função $\mu(t)$ pode ser interpretada como uma taxa de absorção ou termo de fonte do sistema, que auxilia na passagem pela barreira.

A inclusão na equação de Fokker-Planck de um termo referente a uma taxa de absorção, tem sido tratada em alguns artigos (ver referências [34] e [35]). Entretanto, nestes casos, a função $f(x)$ corresponde a um potencial harmônico. Como feito para os outros dois casos anteriores, para definir a probabilidade vamos considerar um *ansatz* da forma:

$$P(x, t) = D(t)Z(x, t)^{1/\nu-1}. \quad (4.3.3)$$

Como foi dito, o termo x^3 corresponde a uma perturbação no potencial harmônico. Assim, a função $Z(x, t)$ deve ser semelhante a empregada anteriormente:

$$Z(x, t) = 1 - (\nu - 1)\beta(t)[x^2 + M(x, t)], \quad (4.3.4)$$

sendo $M(x, t)$ uma função a ser definida, juntamente com $D(t)$ e $\beta(t)$. Aplicando (4.3.3) em (4.3.2) obtemos então,

$$\begin{aligned} Z(x, t)^{1/\nu-1} \left\{ \frac{dD(t)}{dt} + D(t) \frac{df(x)}{dx} - QD(t)^\nu \left(\frac{\nu}{\nu-1} \right) \frac{\partial^2 Z}{\partial x^2} - D(t)\mu(t) \right\} + \\ + \frac{Z(x, t)^{2-\nu/\nu-1}}{\nu-1} \left\{ D(t) \frac{\partial Z}{\partial t} + f(x) \frac{\partial Z}{\partial x} - QD(t)^\nu \left(\frac{\nu}{\nu-1} \right) \left(\frac{\partial Z}{\partial x} \right)^2 \right\} = 0 \end{aligned} \quad (4.3.5)$$

Para que a igualdade acima seja verdadeira os termos entre chaves precisam se anular, logo, é possível escrever um sistema de duas equações diferenciais, tal que, substituindo $f(x)$ e (4.3.4), temos:

$$\frac{dD(t)}{dt} - D(t)k_1 + 2D(t)k_2x + QD(t)^\nu \nu\beta(t) \left(2 + \frac{\partial^2 M}{\partial x^2} \right) + \mu(t)D(t) = 0, \quad (4.3.6)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial M}{\partial t} + \frac{(x^2 + M(x, t))}{\beta(t)} \frac{d\beta(t)}{dt} + (-k_1x + k_2x^2) \left(2x + \frac{\partial M}{\partial x} \right) + \\ + Q\nu\beta(t)D(t)^{\nu-1} \left\{ 4x^2 + 4x \frac{\partial M}{\partial x} + \left(\frac{\partial M}{\partial x} \right)^2 \right\} = 0. \end{aligned} \quad (4.3.7)$$

Da relação (4.3.6) há elementos dependentes e independentes de x que, assumiremos se cancelarem formando o seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} \frac{dD(t)}{dt} - D(t)k_1 + 2QD(t)^\nu \nu \beta(t) + \mu(t)D(t) = 0 & ai) \\ -2k_2 D(t)x - QD(t)^\nu \nu \beta(t) \frac{\partial^2 M}{\partial x^2} = 0 & bi) \end{cases} \quad (4.3.8)$$

Com este procedimento, a equação (4.3.6) foi dividida em duas novas equações e da mesma forma, também vamos separar a relação (4.3.7) em duas novas equações. Uma é dada por todos os termos dependentes de x^2 , mas que não estão relacionados com a função $M(x,t)$, e a outra equação são os termos restantes de $ii)$, desta maneira:

$$\begin{cases} x^2 \left[\frac{1}{\beta(t)} \frac{d\beta(t)}{dt} - 2k_1 + 4Q \cdot \nu \cdot D(t)^{\nu-1} \cdot \beta(t) \right] = 0 & aii) \\ -\frac{\partial M}{\partial t} - \frac{M}{\beta(t)} \frac{d\beta(t)}{dt} + (k_1 x - k_2 x^2) \frac{\partial M}{\partial x} - 2k_2 x^3 - Q\nu \beta(t) D(t)^{\nu-1} \left\{ 4x \frac{\partial M}{\partial x} + \left(\frac{\partial M}{\partial x} \right)^2 \right\} = 0 & bii) \end{cases} \quad (4.3.9)$$

Este critério foi adotado, porque como foi dito o termo x^3 presente no potencial age como uma perturbação em um potencial harmônico e devido a isto, foi acrescentada a função $M(x,t)$ no *ansatz* (4.1.2). Se desconsideramos as relações *bi)* e *bii)*, voltamos novamente ao sistema apresentado no caso $f(x) = -k_1 x$, equação (4.2.4) a menos do termo de fonte $\mu(t)$.

Isolando o termo $2Q\nu D(t)^\nu \beta(t)$ de *ai)* e substituindo em *aii)* encontramos a seguinte expressão:

$$\frac{1}{\beta(t)} \frac{d\beta(t)}{dt} - \frac{2}{D(t)} \frac{dD(t)}{dt} - 2\mu(t) = 0 \quad (4.3.10)$$

Integrando (4.3.10) em relação a t , chegamos que $\beta(t)$ é definido como:

$$\beta(t) = \frac{\beta_0}{D_0^2} D(t)^2 e^{2T(t)} \quad (4.3.11)$$

sendo a função $T(t) = \int \mu(t) dt$.

A equação *bi)* fornece a função $M(x,t)$ que satisfaz o problema, para isto basta integrar duas vezes em relação a x e para facilitar já substituiremos a função $\beta(t)$ pela definição (4.3.11). Portanto, a expressão é:

$$M(x,t) = \frac{-k_2 x^3 e^{-2T(t)}}{3\gamma D(t)}, \quad (4.3.12)$$

onde γ é uma constante igual a $Q\nu\beta_0/D_0$, adotada para facilitar a notação. As constantes de integração acima são consideradas iguais a zero, porque queremos que no momento inicial ($t = 0$) recuperemos a solução estacionária.

Aplicando a definição de $M(x,t)$ e de $\beta(t)$ em *bii*) podemos encontrar uma maneira de definir a função $\mu(t)$ para este problema. Assim, segue que,

$$\begin{aligned} & -\frac{k_2(\nu+1)x^3e^{-2T(t)}}{3\gamma D(t)^{\nu+2}}\frac{dD}{dt} - \frac{2k_2x^3e^{-2T(t)}}{3\gamma D(t)^{\nu+1}}\frac{dT}{dt} + \frac{2k_2x^3e^{-2T(t)}}{3\gamma D(t)^{\nu+1}}\left\{\frac{1}{D(t)}\frac{dD(t)}{dt} + \mu(t)\right\} - \frac{2k_1k_2x^3e^{-2T(t)}}{\gamma D(t)^{\nu+1}} + \\ & + \frac{9k_2^2x^4e^{-2T(t)}}{\gamma D(t)^{\nu+1}} - 6k_2x^3 + \gamma D(t)^{\nu+1}e^{2T(t)}\frac{3k_2x^2e^{-2T(t)}}{\gamma D(t)^{\nu+1}}\left\{4x - \frac{3k_2x^2e^{-2T(t)}}{\gamma D(t)^{\nu+1}}\right\} = 0. \end{aligned} \quad (4.3.13)$$

A função $T(t)$ é a integral do termo de fonte em certo intervalo de tempo t . Logo, a sua derivada vai ser igual ao próprio integrando, $\mu(t)$, fazendo com que o segundo termo de (4.3.13) se cancele com o segundo termo dentro da primeira chave.

Também, quando fazemos o processo distributivo do último elemento em (4.3.14), vemos que aparece um termo dependente de x^4 , mas que se cancela com outro de mesma ordem. Desta forma, obtemos a seguinte expressão:

$$-\frac{k_2(\nu+1)x^3e^{-2T(t)}}{\gamma D(t)^{\nu+2}}\frac{dD}{dt} + \frac{k_2x^3e^{-2T(t)}}{\gamma D(t)^{\nu+1}}\frac{2}{D(t)}\frac{dD(t)}{dt} - \frac{6k_1k_2x^3e^{-2T(t)}}{\gamma D(t)^{\nu+1}} - 6k_2x^3 + 12k_2x^3 = 0, \quad (4.3.14)$$

ou ainda, fazendo algumas simplificações chegamos a:

$$-\frac{(\nu-1)}{3}\frac{dD}{dt} - 2k_1D(t) + 2\gamma D(t)^{\nu+2}e^{2T(t)} = 0. \quad (4.3.15)$$

Até o presente momento, a partir de um sistema de 4 equações (*ai*, *bi*, *aii* e *bii* de (4.3.8) e (4.3.9)), definimos $\beta(t)$ e $M(x,t)$ em função de $D(t)$ e $\mu(t)$ que ainda não foram encontradas. Para obter essas expressões vamos comparar as equações (4.3.15) e *ai*):

$$\begin{cases} \frac{dD(t)}{dt} - 2D(t) \cdot k_1 + 2\gamma D(t)^{\nu+2}e^{2T(t)} + \mu(t) \cdot D(t) = 0 \\ -\frac{(\nu-1)}{3}\frac{dD}{dt} - 2k_1D(t) + 2\gamma D(t)^{\nu+2}e^{2T(t)} = 0 \end{cases} \quad (4.3.16)$$

Como pode ser observado, ambas se assemelham a não ser pela derivada em relação $D(t)$ na segunda equação que apresenta uma constante multiplicativa $((\nu-1)/3)$ e o produto $\mu(t)D(t)$ na primeira equação. Subtraindo uma da outra, temos que:

$$\frac{dD(t)}{dt} + \frac{(\nu-1)}{3}\frac{dD}{dt} + \mu(t)D(t) = 0 \quad (4.3.17)$$

e rearranjando os termos de (4.3.17), obtemos uma relação para $\mu(t)$ em função de $D(t)$:

$$\mu(t) = -\frac{(\nu + 2)}{3D(t)} \frac{dD}{dt} \quad (4.3.18)$$

Através da relação encontrada acima vamos reescrever $T(t)$ como:

$$T(t) = \int \mu(t) dt = \int \frac{d}{dt} \left[\ln(D(t))^{-(\nu+2)/3} \right] dt, \quad (4.3.19)$$

ou,

$$T(t) = \ln(D(t))^{-(\nu+2)/3}. \quad (4.3.20)$$

Utilizando (4.3.20), o termo exponencial é substituído por,

$$e^{2T(t)} = e^{\ln(D(t))^{-2(\nu+2)/3}} = D(t)^{-2(\nu+2)/3}. \quad (4.3.21)$$

Substituindo a relação acima em (4.3.16) conseguimos uma equação dependente, somente da função $D(t)$ que solucionada fornece as outras funções $\beta(t)$, $M(x,t)$ e $\mu(t)$. Por simplicidade vamos trabalhar com a segunda equação do sistema (4.3.16) e para isto, a reescrevemos como:

$$\frac{dD^{-(\nu-1)/3}}{dt} - 2k_1 D^{-(\nu-1)/3} + 2\gamma = 0. \quad (4.3.22)$$

Agora consideramos que $D^{-(\nu-1)/3}$ é representado pela expressão:

$$D^{-(\nu-1)/3} = A + Be^{bt}, \quad (4.3.23)$$

onde A , B e b são constantes que definiremos de forma a atender nosso problema. Substituindo (4.3.23) em (4.3.22), temos que:

$$Bbe^{bt} - 2k_1 (A + Be^{-bt}) + 2\gamma = 0. \quad (4.3.24)$$

Esta igualdade é satisfeita se $A = \gamma / k_1$ e $b = 2k_1$. Portanto, a expressão de $D(t)$ é

$$D^{-(\nu-1)/3} = \frac{\gamma}{k_1} + Be^{2k_1 t}. \quad (4.3.25)$$

A constante B é definida assumindo que para $t = 0$, (4.3.3) tenha valor máximo igual a 1, maximizando a distribuição de probabilidade. Desta maneira,

$$D(t=0) = \left\{ \frac{\gamma}{k_1} + B \right\}^{-3/(\nu-1)} = 1, \quad (4.3.26)$$

isto é,

$$B = 1 - \frac{\gamma}{k_1}, \quad (4.3.27)$$

sendo $\gamma = Q\nu\beta_0 / k_1 D_0^2$.

Portanto,

$$D(t) = \left\{ \frac{\gamma}{k_1} + \left(1 - \frac{\gamma}{k_1} \right) e^{2k_1 t} \right\}^{-3/(\nu-1)}, \quad (4.3.28)$$

e, desta forma, utilizando as relações (4.3.10), (4.3.11) e (4.3.17) encontramos as funções $\beta(t)$, $M(x,t)$ e $\mu(t)$:

$$\beta(t) = \frac{\beta_0}{D_0^2} \left\{ \frac{\gamma}{k_1} + \left(1 - \frac{\gamma}{k_1} \right) e^{2k_1 t} \right\}^2, \quad (4.3.29)$$

$$\mu(t) = -2 \frac{(\nu+2)}{(\nu-1)} \left(k_1 A^{-1/3} - \gamma \right) e^{2k_1 t} \left\{ \frac{\gamma}{k_1} + \left(1 - \frac{\gamma}{k_1} \right) e^{2k_1 t} \right\}^{-1} \quad (4.3.30)$$

e

$$M(x,t) = \frac{-k_2 x^3}{\gamma} \left\{ \frac{\gamma}{k_1} + \left(1 - \frac{\gamma}{k_1} \right) e^{2k_1 t} \right\}. \quad (4.3.31)$$

Definidas todas as funções do *ansatz* (4.3.3) a probabilidade é expressa como:

$$P(x,t) = \left\{ \frac{Q\nu\beta_0}{k_1 D_0^2} + \left(1 - \frac{Q\nu\beta_0}{k_1 D_0^2} \right) e^{2k_1 t} \right\}^{-3/\nu-1} \cdot \left\{ 1 - (\nu-1) \frac{\beta_0}{D_0^2} \left(\frac{Q\nu\beta_0}{k_1 D_0^2} + \left(1 - \frac{Q\nu\beta_0}{k_1 D_0^2} \right) e^{2k_1 t} \right) \right. \\ \left. \left[x^2 - \left(\frac{Q\nu\beta_0}{k_1 D_0^2} + \left(1 - \frac{Q\nu\beta_0}{k_1 D_0^2} \right) e^{2k_1 t} \right) x^3 \right] \right\}^{1/\nu-1} \quad (4.3.32)$$

Dependências temporais da taxa de absorção como apresentado aqui (4.3.30) podem ser observadas em muitos sistemas bioquímicos [36, 37] quando analisamos taxas de absorção que abrem a possibilidade de aproximar este modelo teórico com dados de reações ou interações, obtidos em laboratório.

5. ANÁLISE DOS RESULTADOS EXPLÍCITOS

Neste capítulo são apresentados os gráficos correspondentes a densidade de probabilidade para cada caso estudado. Para a obtenção destes gráficos foi utilizado o programa matemático Maple, que facilitou a construção destas superfícies. O valor das constantes são dadas em cada item e foram escolhidas apenas para exemplificar o comportamento da função $P(x,t)$.

5.1. Partícula Confinada

O primeiro modelo estudado se relaciona a uma partícula confinada, abaixo se encontra a distribuição de probabilidade $P(x,t)$ dada pela equação (4.1.2):

$$P(x,t) = \{1 + 2(\nu + 1)Q\nu\beta_0 t\}^{-1/(\nu+1)} \left\{ 1 - (\nu - 1) \frac{x^2}{\beta_0 \{1 + 2(\nu + 1)Q\nu\beta_0 t\}^{2/(\nu+1)}} \right\}^{1/(\nu-1)} \quad (5.1.1)$$

Para efeito de análise quantitativa, o coeficiente de difusão (Q) foi considerado igual a 0,5 e β_0 igual a 1. As figuras 9 e 10 relacionam $P(x,t)$ contra a posição x para diferentes valores de tempo. A caixa é dimensionada de forma que $-L \leq x \leq L$ é dimensionada adotando-se $L = 2$. A evolução temporal foi regida desde $t = 0$ até 5 unidades de tempo (5u).

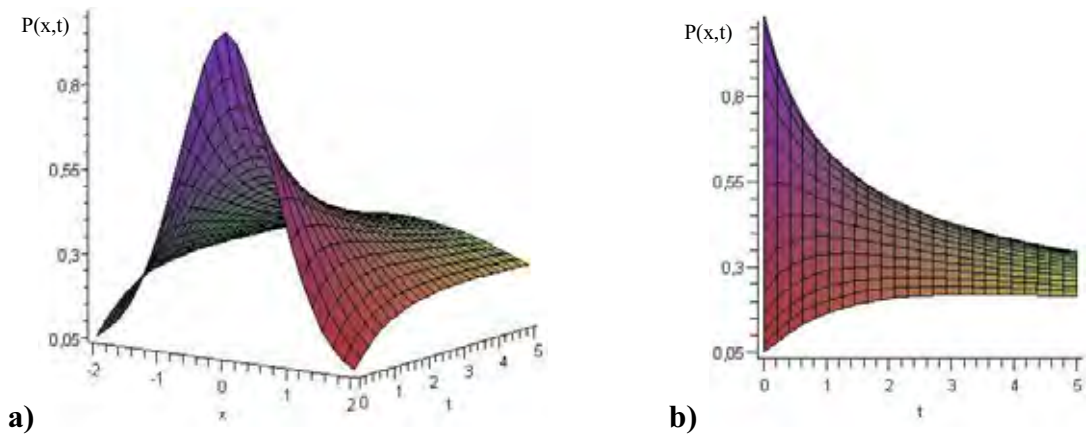


Figura 9: Os gráficos acima mostram a evolução da Probabilidade em um intervalo de tempo t de 0 a 5u com $\nu = 0,5$

Analisando a figura 9, veremos que inicialmente a distribuição de $P(x,t)$ se anula nos extremos (-2 e 2), e na região central ($x = 0$) ocorre o máximo valor da distribuição de probabilidade. Percebe-se também que com o aumento do tempo, $P(x,t)$ decai suavemente, atingindo um valor constante para tempos muito grandes (maiores que 5). Isto indica que a partir deste valor, a distribuição de probabilidade tornou-se constante com um valor máximo de, aproximadamente, 0,4 em $x = 0$.

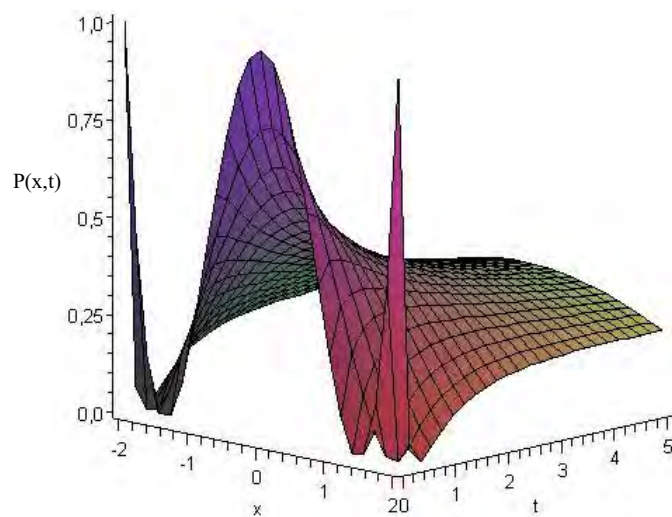


Figura 10: Gráfico representativo da evolução da Probabilidade em um intervalo de tempo $t = 5u$ com $\nu = 1,5$

Comparando a figura 9 (a) com a figura 10, notamos uma diferença no comportamento da curva. Inicialmente ($t = 0$), ela apresenta três picos de probabilidade situados um na região central e outros dois laterais situados sobre os limites da região.

Se aumentarmos a região do gráfico, veremos que estes picos laterais apresentam um valor muito grande e reduzem a área do pico central. Contudo, conforme o tempo aumenta os dois picos laterais desaparecem e o comportamento deste gráfico se assemelha muito ao apresentado na figura 9.

Como a partícula está oscilando dentro da região de $L = \pm 2$, nos extremos ela apresenta uma velocidade nula gerando uma probabilidade de encontrá-la nestas posições também. Conforme o intervalo de tempo aumenta a velocidade da partícula diminui e a probabilidade fica mais uniformemente distribuída no espaço, diminuindo o valor de $P(x,t)$ em $x = 0$ e eliminando os picos laterais.

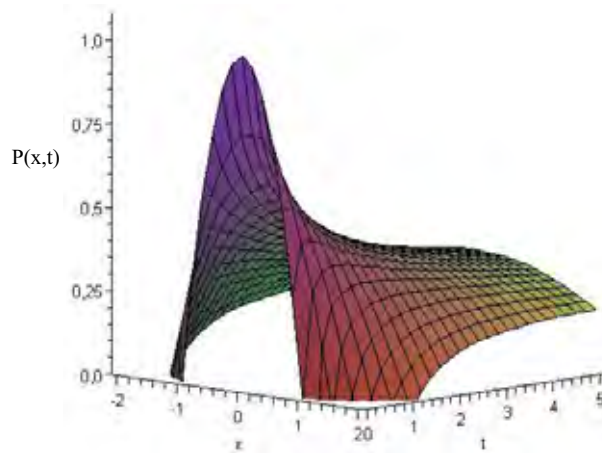


Figura 11: O gráfico acima mostra o comportamento de $P(x,t)$ em um intervalo de tempo $t = 5$ com $\nu = 2$

Assim como a figura 10, o gráfico 11 também apresenta um comportamento distinto da figura 9 nas laterais. Para um valor igual a 2 do parâmetro não-linear, a curva de probabilidade mostra-se mais fina inicialmente, possuindo valores negativos a partir de $x = 1$. A partir de um instante $t = 1$, a evolução de $P(x,t)$ passa a ser semelhante como nos gráficos anteriores.

Podemos concluir que para valores de ν maiores que 1, a distribuição de probabilidade apresenta um comportamento inusitado na região correspondente ao limite do sistema e que afeta a largura da distribuição central de $P(x,t)$. Entretanto, a partir de certo valor de tempo, ambos os gráficos exibem o mesmo comportamento indicando que a influencia da não linearidade é pequena.

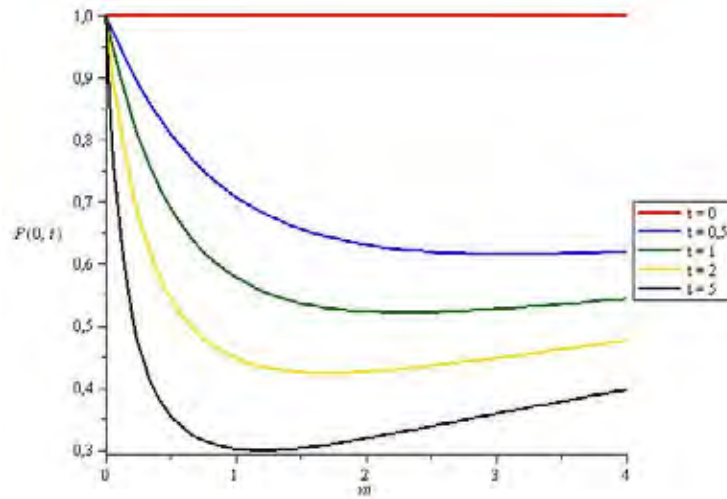


Figura 12: O gráfico acima mostra o comportamento de $P(x,t)$ em para um ponto fixo no espaço ($x = 0$) para diferentes valores de tempo e ν

A última ilustração (fig. 12) considera a distribuição de probabilidade no ponto central ($x = 0$) e seu objetivo é comparar a evolução temporal para diferentes valores de ν . Para um tempo inicial vemos que independente do valor do parâmetro não linear ν , $P(0,t)$ possui o mesmo valor, em $\nu = 1$ a probabilidade apresenta um decaimento mais rápido que para outros valores de ν .

Também, conforme variamos o parâmetro não linear de 0 a 1 vemos que $P(x,t)$ apresenta um decaimento mais rápido, porém quando ν varia de 1 a 4 esta velocidade de decaimento da probabilidade diminui, ou seja, nestes intervalos para tempos relativamente grandes ($t = 5$) a probabilidade de encontrar uma partícula no centro é maior que no caso linear ($\nu = 1$).

5.2. Potencial Harmônico

O segundo modelo estudado se refere a um potencial harmônico simples. A seguir a solução da equação de FPNL (1.3):

$$P(x,t) = \left\{ \frac{2Q\nu\beta_0}{kD_0^2} + \left(1 - \frac{2Q\nu\beta_0}{kD_0^2} \right) e^{-k \cdot (\nu+1)t} \right\}^{-1/(\nu+1)} \left\{ 1 - (\nu-1)x^2 \right. \\ \left. \cdot \frac{\beta_0}{D_0^2} \left[\frac{2Q\nu\beta_0}{kD_0^2} + \left(1 - \frac{2Q\nu\beta_0}{kD_0^2} \right) e^{-k \cdot (\nu+1)t} \right]^{-2/(\nu+1)} \right\}^{1/(\nu-1)}. \quad (5.2.1)$$

sendo k a constante elástica do oscilador e Q o coeficiente de difusão. Por facilidade, as curvas apresentadas a seguir foram feitas considerando $\beta_0 / D_0^2 = Q\nu / k$. A figura 13 mostra a probabilidade para diferentes tempos:

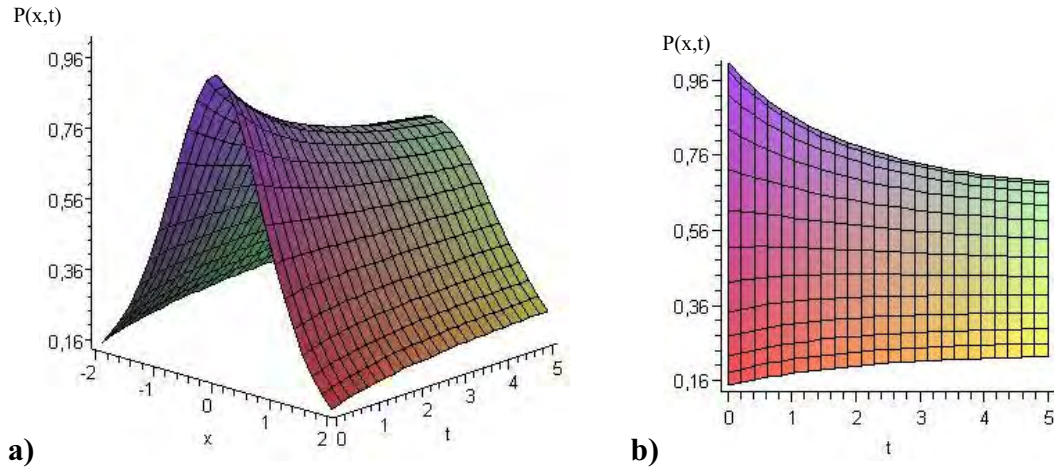


Figura 13: Gráficos representando a evolução temporal de $P(x,t)$ considerando $\nu = 0,5$.

Pela figura 13, vemos que diferente do primeiro caso (potencial nulo) a distribuição de probabilidade atinge um valor estacionário maior, aproximadamente, 0,68. Também notamos que a região mais provável de encontrar a partícula corresponde a posição central ($x = 0$). Isto é interessante, pois a equação de Fokker-Planck é uma equação clássica, mas a densidade de probabilidade clássica na literatura, obtida a partir da solução das equações de movimento para o potencial harmônico é maior nos pontos extremos do movimento, onde a velocidade se anula.

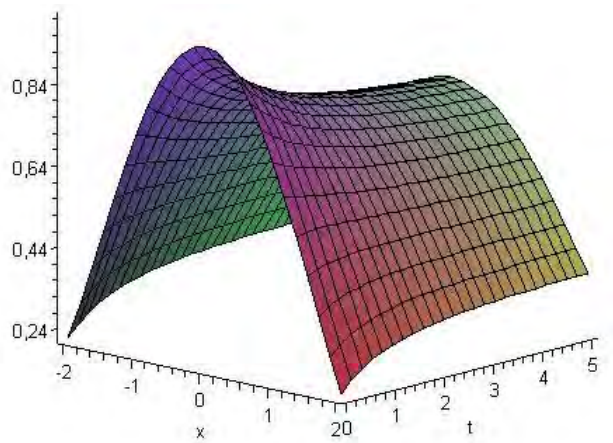


Figura 14: Gráfico representando a evolução temporal de $P(x,t)$ considerando $\nu = 1,5$.

A figura 14, também mostra o comportamento de $P(x,t)$ para um intervalo de tempo igual a 5, mas com o valor do parâmetro não linear igual a 1,5. Ao contrário da figura 9, não é observada nenhuma anomalia nos extremos da região do potencial, indicando que a alteração de ν afeta de forma distinta cada modelo. Comparando este gráfico com o anterior (fig. 13), vemos que a variação deste parâmetro provocou um alargamento da distribuição de probabilidade, ao invés de reduzir como no modelo de potencial nulo. Ainda, notamos que o regime estacionário ou de equilíbrio para a figura 14 apresenta um valor máximo em torno de 0,77 em $x = 0$.

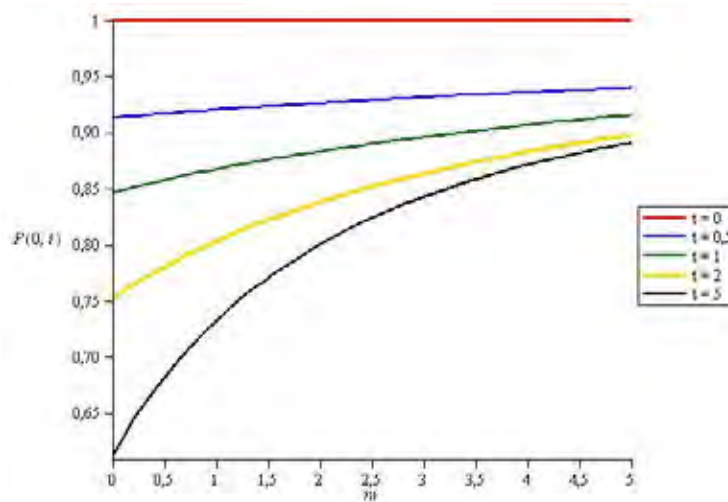


Figura 15: Gráfico correspondente ao comportamento de $P(x,t)$ em para um ponto fixo no espaço ($x = 0$) para diferentes valores de tempo e ν

A última ilustração apresenta a distribuição de probabilidade no ponto central ($x = 0$) versus ν para diferentes tempos. Consideramos o ponto $x = 0$ por ser a região de maior probabilidade indicada pelas figuras anteriores e um tempo máximo de $t = 5$, pois a partir deste valor $P(x,t)$ atingiu o estado estacionário nos gráficos 13 e 14.

Observamos que em valores de ν pequenos a probabilidade possui um valor de estado estacionário menor, desta maneira, quanto maior o valor do parâmetro não linear, maior a distribuição $P(0,t)$ estacionária. Para valores de ν próximos de 5 ou maiores, há uma curva referente a probabilidade em $t = 2$ esta próxima de $t = 5$, isto indica que o estado de equilíbrio do sistema é atingido mais rapidamente.

5.3. Potencial com Barreira

Por fim, o último modelo a ser considerado é referente a um potencial que apresenta uma pequena barreira. Abaixo, está a solução da equação de Fokker-Planck para este caso (1.3):

$$P(x, t) = \left\{ \frac{Qv\beta_0}{kD_0^2} + \left(1 - \frac{Qv\beta_0}{kD_0^2} \right) e^{2k_1 t} \right\}^{-3/\nu-1} \cdot \left\{ 1 - (\nu - 1) \left(\frac{Qv\beta_0}{kD_0^2} + \left(1 - \frac{Qv\beta_0}{kD_0^2} \right) e^{2k_1 t} \right) \left[x^2 - \left(\frac{Qv\beta_0}{kD_0^2} + \left(1 - \frac{Qv\beta_0}{kD_0^2} \right) e^{2k_1 t} \right) x^3 \right]^{1/\nu-1} \right\} \quad (5.3.1)$$

Para este caso também consideramos Q igual a 0,5 e $\nu = 1,5$.

A figura 16 apresenta a distribuição para diferentes tempos com $\nu = 1,5$.

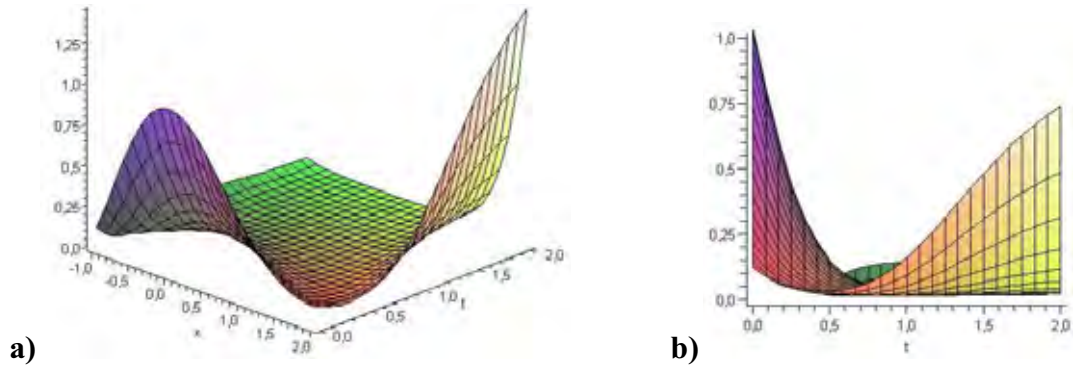


Figura 16: Gráfico da distribuição de probabilidade contra um tempo t .

Observando a figura acima e comparando-a com o gráfico do potencial (figura 8, capítulo 4), a região inicialmente mais provável de encontrar determinada partícula é na região a esquerda da barreira. Conforme o tempo decorre, esta probabilidade diminui e começa a surgir um pico após a posição $x = 2$, que corresponde à posição a direita da barreira.

Este processo de transição ocorre em um intervalo curto de tempo, aproximadamente, 0,7 unidades. Para valores diferentes de ν , os gráficos obtidos apresentaram um comportamento fora do esperado, isto é, houve o aparecimento de máximos de probabilidade novamente na região central após certo intervalo de tempo. Este comportamento é resultado do termo de fonte que faz a partícula oscilar entre as duas regiões com o decorrer de t .

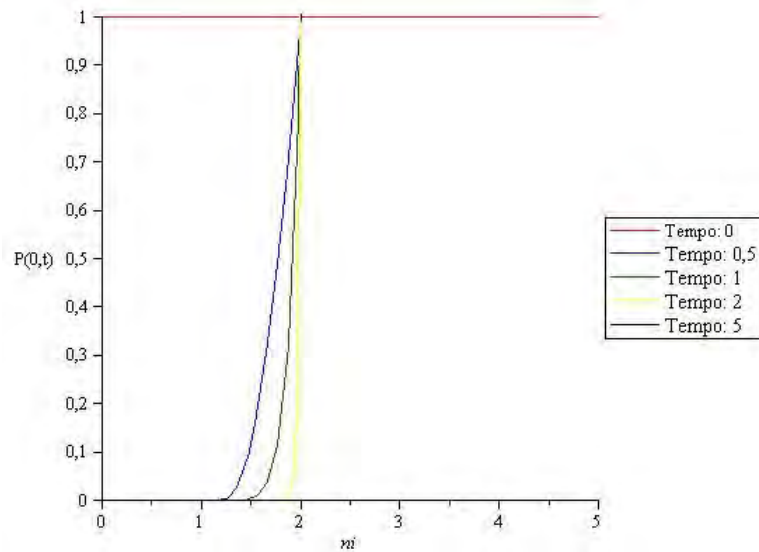


Figura 17: Gráfico da distribuição de probabilidade em $x = 0$ versus v para diferentes valores de tempo.

A figura 17 mostra este comportamento diferenciado da distribuição de probabilidade para diferentes valores de v . Como feito nos outros modelos, fixamos o ponto $x = 0$ que corresponde à posição a esquerda da barreira e cada curva corresponde a um valor de tempo. Pelo gráfico acima, notamos que somente para valores de v próximos de 1,5 há densidade de probabilidade nesta região, para valores maiores que 2 o sistema é caracterizado por um regime superdifusivo e desta forma, a difusão através da barreira ocorre muito rapidamente.

6. ANÁLISE NUMÉRICA

O método numérico aqui descrito foi aplicado a três casos distintos. Primeiro aplicamos o algoritmo para a equação de Fokker-Planck linear considerando o oscilador harmônico e o potencial de Morse. Esses modelos foram escolhidos para aplicar inicialmente a equação de Fokker-Planck linear, porque possuem soluções explícitas e permitem uma maneira de verificar a consistência do sistema numérico usado.

As soluções da EFPL são em sua maioria dadas por expansão em série de uma determinada função $\phi(x)$, isto pode por em dúvida a exatidão do algoritmo, uma vez que possíveis divergências dos resultados podem ser provocadas pelo uso de poucos termos da solução em série. Para o caso do oscilador harmônico, a solução da Fokker-Planck não é unicamente representada por uma série de funções, ela também pode ser dada por uma distribuição gaussiana [2], permitindo desta forma, termos uma análise mais segura a respeito da precisão do procedimento numérico.

Já o caso do potencial de Morse (ver na literatura [25]) só é encontrado a solução da Fokker-Planck linear através da expansão em série, mas o objetivo aqui é verificar sua aplicabilidade em casos onde há uma assimetria no potencial e que, conseqüentemente, implicaria em uma assimetria na distribuição de probabilidade.

O potencial de Morse (V_M) é descrito pela função:

$$V_M(x) = D(1 - e^{-ax})^2 + C \quad (6.1)$$

em que C , D e a são constantes. A figura 18 mostra um exemplo da curva da função $V_M(x)$ versus a posição x , essa curva representa, por exemplo, o potencial entre os átomos de uma molécula diatômica.

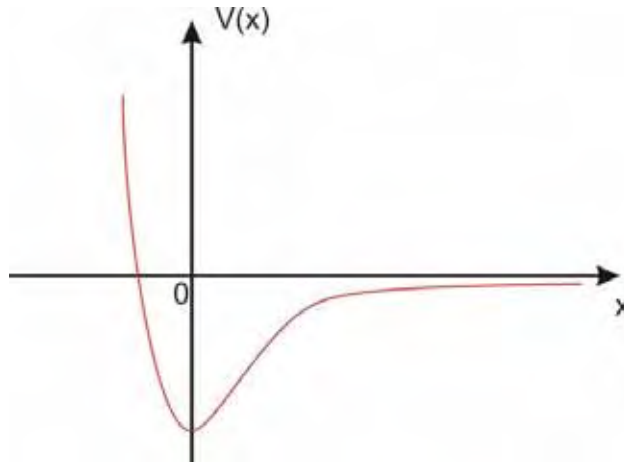


Figura 18: Gráfico do potencial de Morse versus a posição x , usando $D = 1$, $C = -1$ e $a = 1$.

O zero de energia é arbitrariamente escolhido para ocorrer quando os átomos neutros estão distantes; então $V(x)$ torna-se negativo conforme a distância diminui devido à atração de Van der Waals. Como a distância (x) continua a diminuir a aproximação dos núcleos (ou casca iônica) da origem a uma repulsão que faz a energia aumentar e tornar-se grande e positiva.

Por último consideramos a EFPNL aplicada ao potencial harmônico. A seguir, é apresentada uma breve explicação a respeito do algoritmo utilizado e na sequência são mostrados os resultados comparativos para estes três modelos feitos utilizando o programa Origin. Para todas as figuras a seguir o espaçamento da malha em x e t foi igual, $h = 2 \cdot 10^{-3}$ e $k \cong 2 \cdot 10^{-6}$.

6.1. Eliminação de Gauss

Como pode ser observado, a obtenção de soluções analíticas para equações diferenciais parciais não lineares é mais delicada, mas uma maneira de facilitar a sua solução é através do emprego de métodos numéricos, entre eles o método de diferenças finitas já mencionado no capítulo 2.

Neste método o espaço contínuo de determinada equação diferencial é particionado criando uma malha, onde os valores iniciais (t_0) da função são conhecidos. Para fazer esta discretização utilizamos as relações (3.3.3) ou (3.3.4), (3.3.18) e (3.3.20) apresentadas no capítulo 2, que fornecem uma equação cuja variável ou incógnita corresponde à função em um instante (t).

O comportamento da função que satisfaz esta equação diferencial, em determinado intervalo de tempo, é obtido solucionando a função obtida pela discretização e uma das maneiras de fazer isto é utilizando o método de eliminação de Gauss. Para explicá-lo vamos considerar o seguinte sistema de equações:

$$\begin{aligned}
 b_1 u_1 - c_1 u_2 &= d_1 \\
 -a_2 u_1 + b_2 u_2 - c_2 u_3 &= d_2 \\
 -a_4 u_2 + b_3 u_3 - c_3 u_4 &= d_3 \\
 &\vdots \\
 -a_i u_{i-1} + b_i u_i - c_i u_{i+1} &= d_i \\
 &\vdots \\
 -a_n u_{n-1} + b_n u_n &= d_n
 \end{aligned} \tag{6.1.1}$$

O sistema acima é composto por n incógnitas (u), tal que, $i = 1, 2, \dots, n$, e os coeficientes a_i , b_i , c_i e d_i são conhecidos. Este conjunto de equações pode ser representado por uma matriz tridiagonal da forma:

$$\begin{bmatrix} b_1^j & c_1^j & 0 & \dots & 0 \\ a_2^j & b_2^j & c_2^j & 0 & \ddots \\ 0 & a_3^j & b_3^j & c_3^j & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & \dots & 0 & a_n^j & b_n^j \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \vdots \\ u_{i-1}^{j+1} \\ u_i^{j+1} \\ u_{i+1}^{j+1} \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix}$$

A primeira equação pode ser usada para eliminar u_1 da segunda equação, a segunda nova equação usada para eliminar u_2 da terceira equação e assim por diante, até chegarmos a uma única equação que nos fornece u_n . Os termos u_{n-1} , u_{n-2} , ..., u_2 e u_1 podem agora ser definidos utilizando uma substituição retroativa. Por exemplo, vamos considerar que estamos no seguinte passo deste procedimento:

$$\begin{cases} \alpha_{i-1} u_{i-1} + c_{i-1} u_i = S_{i-1} \\ a_i u_{i-1} + b_i u_i + c_i u_{i+1} = d_i \end{cases} \tag{6.1.2}$$

onde $\alpha_1 = b_1$ e $S_1 = d_1$. Eliminando u_{i-1} da segunda equação temos que,

$$\left(b_i - \frac{a_i c_{i-1}}{\alpha_{i-1}} \right) u_i + c_i u_{i+1} = d_i - \frac{a_i S_{i-1}}{\alpha_{i-1}} \tag{6.1.3}$$

ou ainda,

$$\alpha_i u_i + c_i u_{i+1} = S_i, \tag{6.1.4}$$

sendo

$$\alpha_i = b_i - \frac{a_i}{\alpha_{i-1}} c_{i-1} \quad \text{e} \quad S_i = d_i - \frac{a_i}{\alpha_{i-1}} S_{i-1} \quad (i > 1) \tag{6.1.5}$$

O último par de equações do sistema é:

$$\begin{cases} \alpha_{n-1}u_{i-1} - c_{n-1}u_n = S_{n-1} \\ -a_nu_{n-1} + b_nu_n = d_n \end{cases} \quad (6.1.6)$$

Repetindo o processo descrito acima, obtemos que

$$\left(b_n - \frac{a_n c_{n-1}}{\alpha_{n-1}} \right) u_n = d_n + \frac{a_n S_{n-1}}{\alpha_{n-1}} \quad (6.1.7)$$

e também,

$$\alpha_n \cdot u_n = S_n, \quad (6.1.8)$$

As equações (6.1.4) e (6.1.8) mostram que a solução é calculada como

$$u_i = \frac{S_i - c_i u_{i+1}}{\alpha_i}, \quad (6.1.9)$$

sendo $u_n = S_n / \alpha_n$, indo de $(n - 1)$ a 1 e S_i e α_i dados por

$$\alpha_i = b_i - \frac{a_i}{\alpha_{i-1}} c_{i-1} \quad \text{e} \quad S_i = d_i - \frac{a_i}{\alpha_{i-1}} S_{i-1}, \quad (6.1.10)$$

com i variando de 2 a n e para $i = 1$, $\alpha_1 = b_1$ e $S_1 = d_1$.

Utilizando o processo descrito acima, resolvemos a equação FPNL discretizada (3.3.19):

$$\begin{aligned} & -\nu\theta QrP_{i-1,j}^{\nu-1}w_{i-1} + (1 + 2\nu\theta QrP_{i,j}^{\nu-1})w_i - \nu\theta QrP_{i+1,j}^{\nu-1}w_{i+1} = \\ & = -\left(rh^2 \frac{df(x)}{dx} - rhf(x) + 2QrP_{i,j}^{\nu-1} \right) P_{i,j} - \left(rhf(x) - QrP_{i+1,j}^{\nu-1} \right) P_{i+1,j} + QrP_{i-1,j}^{\nu}. \end{aligned}$$

Os coeficientes a_i^j , b_i^j e c_i^j correspondem, respectivamente, a

$$a_i^j = -\nu\theta QrP_{i-1,j}^{\nu-1}, \quad (6.1.11)$$

$$b_i^j = 1 + 2\nu\theta QrP_{i,j}^{\nu-1} \quad (6.1.12)$$

e

$$c_i^j = -\nu\theta QrP_{i+1,j}^{\nu-1}. \quad (6.1.13)$$

Já os coeficientes d_i^j são dados pelo lado direito da igualdade e os valores iniciais da probabilidade são definidos pela solução estacionária. Para obter os valores de $P(x,t)$ em determinado instante t , basta aplicar o método de eliminação de Gauss n vezes de acordo com a relação de discretização do tempo:

$$t = t_o + j \cdot k \quad j = 0, 1, 2, \dots, n,$$

lembrando que o valor da probabilidade em um segundo instante de tempo é definido como $P_{i,j+1} = w_i + P_{i,j}$.

6.2. Resultados

As figuras na sequência mostram a comparação entre a solução explícita e a numérica para a equação de Fokker-Planck linear considerando o modelo do oscilador harmônico em diferentes valores de tempo. O valor da probabilidade em cada instante foi obtido aplicando o método de eliminação de Gauss para solucionar a equação (1.1) considerando a discretização em x e t , respectivamente, $h = 2 \cdot 10^{-3}$ e $k = 2 \cdot 10^{-6}$.

A solução analítica da EFP utilizada neste caso é dada como [1]:

$$P(x,t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T(1 - e^{-2\gamma t})}} \cdot \exp\left\{\frac{-m(x - x_0 e^{-\gamma t})^2}{2k_B T(1 - e^{-2\gamma t})}\right\}, \quad (6.2.1)$$

onde m representa a massa da partícula, T é a temperatura do ambiente, k_B é a constante de Boltzmann, x_0 equivale a posição inicial, t representa o tempo e γ é a constante de amortecimento. A equação (6.2.1) pode ser simplificada considerando que o coeficiente de difusão é dado como $Q = 2\gamma k_B T / m$ [2]. Assim, a solução estacionária para a EFPL, a ser utilizada no método de diferenças finitas é:

$$P(x) = \sqrt{\frac{\gamma}{Q\pi}} e^{-\gamma x^2 / Q}. \quad (6.2.2)$$

Os valores das constantes utilizadas para a construção das figuras 19, 20 e 21 foram Q igual a 0,5 e γ igual a 1.

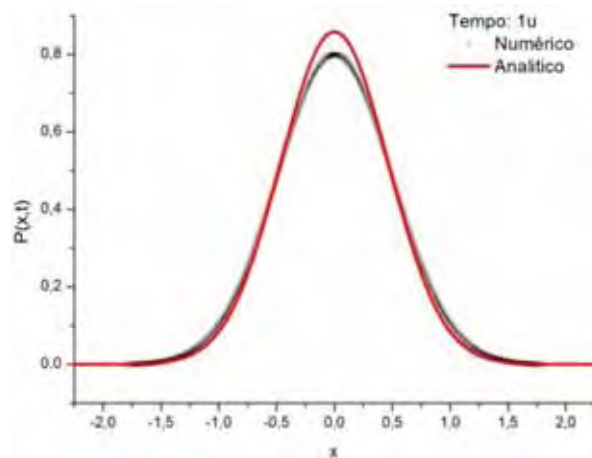


Figura 19: Comparação entre $P(x,t)$ obtido a partir da eq. (6.2.1) e o resultado fornecido pelo algoritmo para $t = 1u$.

Como são observadas, as curvas acima apresentam uma região de sobreposição nas laterais e uma diferença na posição central referente ao ponto máximo da probabilidade. Esse gráfico que corresponde a 1 unidade de tempo (1u) em $x = 0$ o valor da solução analítica é, aproximadamente, 0,84 enquanto que a solução numérica é 0,80, o que fornece um desvio na região central de 0,04.

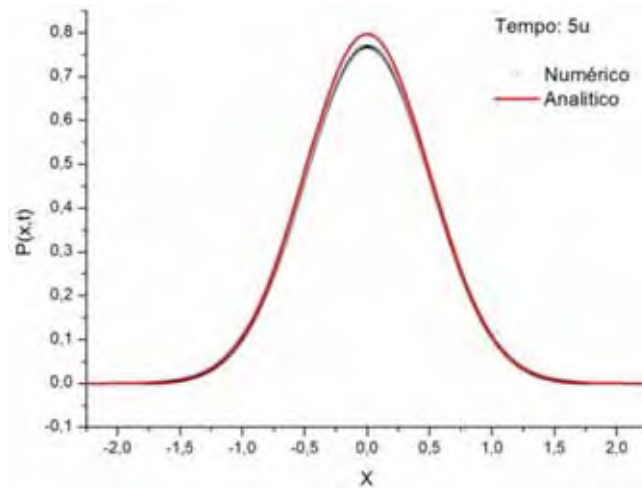


Figura 20: Gráfico de $P(x,t)$ contra x com $t = 5u$ para a solução analítica e a numérica.

Da mesma forma que a figura anterior, a figura 20 também apresenta uma boa sobreposição entre as duas curvas de probabilidade nas laterais e uma divergência na região central, entretanto, esta diferença é menor. O valor analítico e o resultado numérico aproximados em $x = 0$ são, respectivamente, 0,79 e 0,76 que dá uma diferença da ordem de 0,03.

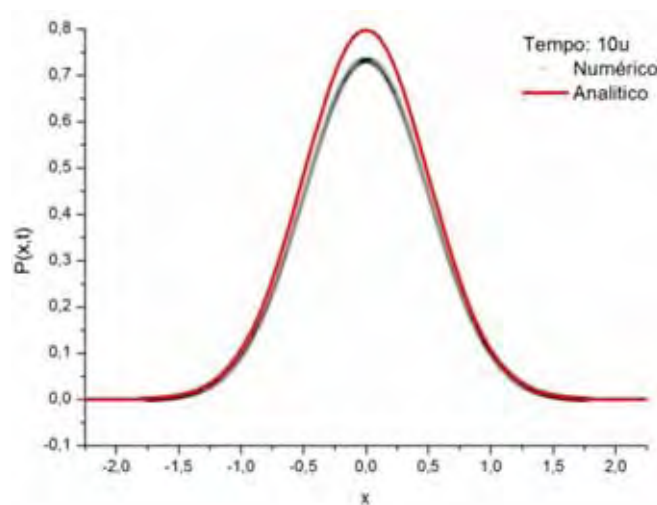


Figura 21: Gráfico de $P(x,t)$ para $t = 10$ unidades comparando resultado analítico com o numérico.

O último gráfico comparativo para o oscilador harmônico considerando a EFPL (figura 21) apresenta uma diferença maior nas curvas tanto no valor de $P(x,t)$ máximo quanto na região em x . A probabilidade analiticamente apresenta um máximo de valor 0,79, enquanto que a obtida numericamente é de 0,73 dando assim uma diferença de 0,6. Esta diferença no valor de $P(x,t)$ é compreendido como resultado do erro numérico acumulado a cada iteração. Para termos a precisão indicada nas figuras 19, 20 e 21 foi necessário particionar o espaço em x e t em um grande número de pontos ($h = 2 \cdot 10^{-3}$ e $k = 2 \cdot 10^{-6}$), conferindo, consequentemente, um número de iterações ou aplicações do método de eliminação de Gauss da ordem de 10^3 para t igual a 1.

A figura 22 é referente ao potencial de Morse (6.1) e sua respectiva distribuição de probabilidade:

$$P(y,t) = \sum_{n=0}^N \left(\frac{1}{\Gamma(1+n+2s)} \right)^{1/2} \frac{n!}{\Gamma(1+n) \cdot \Gamma(1+2s)} \cdot e^{-y} y^{-2s} \cdot L_n^{2s}(y) \cdot e^{-t|\Lambda_n|}, \quad (6.2.3)$$

sendo y igual a $\beta e^{-\alpha x}/Qa$, $2s$ é igual a $-2N-2\alpha-1$, $\beta = \sqrt{DQ/2}$, $\alpha = aQ - \sqrt{DQ/2}$ e Λ_n são os autovalores da série, calculados como:

$$\Lambda_n = a^2 Q n^2 + \gamma a n. \quad (6.2.4)$$

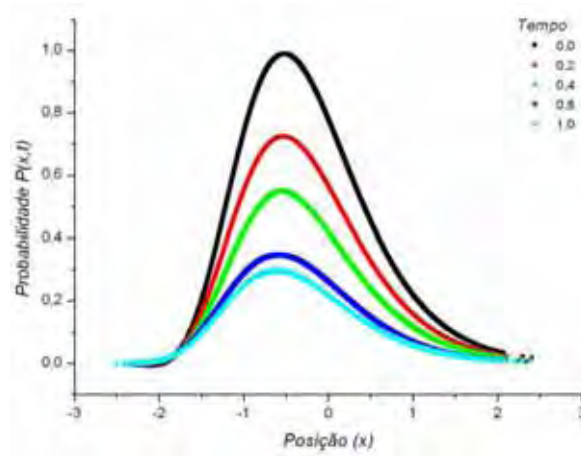


Figura 22: Gráfico de probabilidade (6.2.3) versus x para diferentes tempos.

Para construir a figura acima, assumimos dois termos da série (6.2.3) e consideramos apenas para ilustração os valores dos parâmetros β/aQ , a , s e $-2N-2\alpha-1$ iguais a 1. Já a função $\Gamma(1+2s)$ igual a 2. A solução estacionária utilizada no método numérico é representada por:

$$P(x) = \frac{1}{(\Gamma(1+2s))^{3/2}} \cdot \exp\left(\frac{2\beta}{a\Gamma} e^{-ax}\right) \left(\frac{2\beta}{a\Gamma} e^{-ax}\right)^{-2N-2\alpha-1} \quad (6.2.5)$$

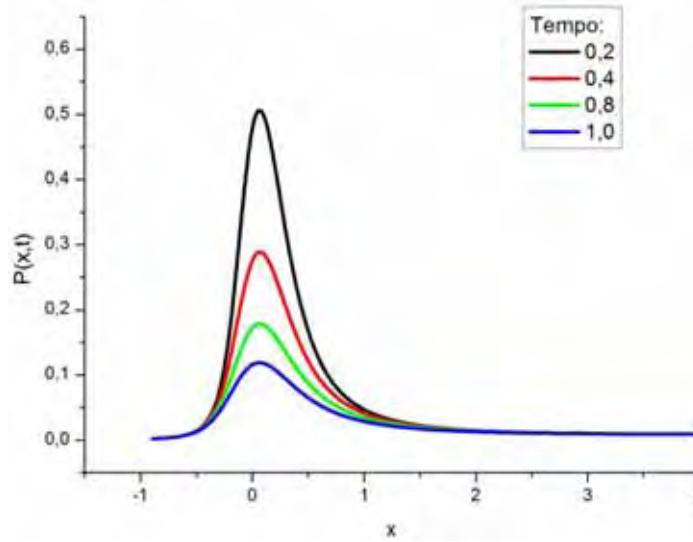


Figura 23: Gráfico de $P(x,t)$ versus x para diferentes tempos.

Apesar de não termos sobreposto as curvas da figura 22 e 23 percebemos uma semelhança na distribuição de probabilidade. Como esperado, o método numérico gerou um gráfico assimétrico consistente com o formato do potencial de Morse (fig. 18), isto é, a probabilidade é maior na posição central ($x = 0$), onde há o mínimo de energia e ocorre um decaimento mais suave de $P(x,t)$ no lado direito da curva que corresponde justamente a região onde não há impedimento no potencial. Isto é importante, pois mostra que mesmo para modelos assimétricos, ou seja, potenciais que apresentem um comportamento distinto em certas posições espaciais, o mapeamento da distribuição de probabilidade para o caso linear fornece resultados semelhantes aos analíticos.

Por fim, aplicamos o método de diferença finita na equação de FPNL para o caso harmônico. A solução estacionária é dada como:

$$P(x) = A^{1/\nu-1} \left(1 - \frac{(\nu-1)}{\nu Q A} k x^2 \right)^{1/\nu-1}, \quad (6.2.6)$$

sendo $A^{1/\nu-1}$ a constante de normalização. A solução completa, isto é, apresentando a dependência temporal foi definida no capítulo 4 como sendo:

$$P(x,t) = \left[\frac{2Q\nu\beta_0}{kD_0^2} + \left(1 - \frac{2Q\nu\beta_0}{kD_0^2} \right) e^{-k(\nu+1)t} \right]^{-\frac{1}{\nu+1}} \left\{ 1 - (\nu-1) \frac{\beta_0}{D_0^2} \left[\frac{2Q\nu\beta_0}{kD_0^2} + \right. \right.$$

$$+ \left(1 - \frac{2Qv\beta_0}{kD_0^2} \right) e^{-k \cdot (v+1)t} \left]^{-2/(v+1)} x^2 \right\}^{1/(v-1)}. \quad (6.2.7)$$

A figura 24 compara as soluções, analítica (linha vermelha) e numérica (linha preta), da equação de Fokker-Planck não linear para dois valores de tempo pequenos (0,1 e 0,5). O valor de v e Q é 0,5, a constante do oscilador (γ) foi considerada 0,2 e a constante de normalização $A^{1/(1-v)}$ assumimos como sendo 1 para todos os gráficos subsequentes.

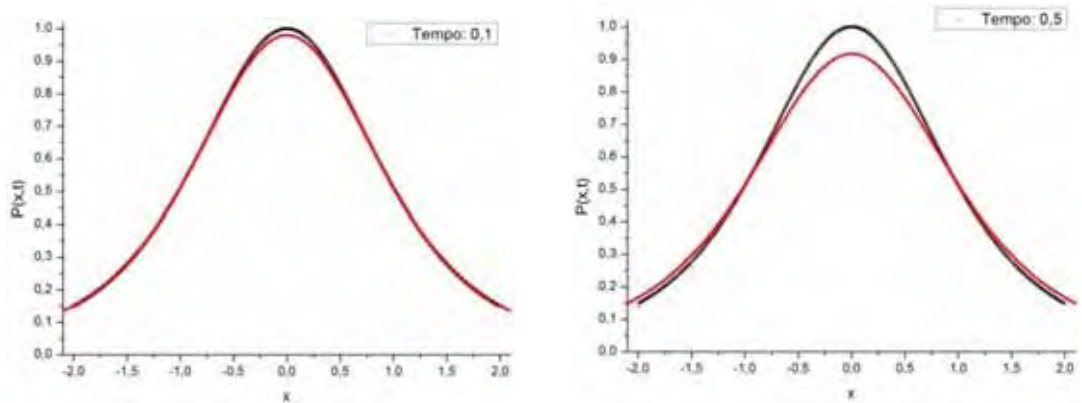


Figura 24: Gráfico de $P(x,t)$ para t pequenos, comparando o resultado analítico com o numérico.

Observando os dois gráficos acima, notamos que para ambos os tempos (0,1 e 0,5) ocorre uma sobreposição da curva analítica com a numérica havendo uma diferença na região central, da mesma forma como foi observado nas figuras 19, 20 e 21. Para o tempo de 0,1 a diferença nas curvas é em torno de 0,02; já para o tempo de 0,5 a diferença é maior, aproximadamente 0,09.

A evolução temporal de $P(x,t)$ através do método numérico foi praticamente nula de 0,1 a 0,5, mas quando aumentamos o tempo para 1, percebemos uma diferença no comportamento da curva de probabilidade obtida em comparação com o resultado analítico/exato. O gráfico a seguir (figura 25) é referente também ao potencial harmônico, mas foi utilizado um tempo maior.

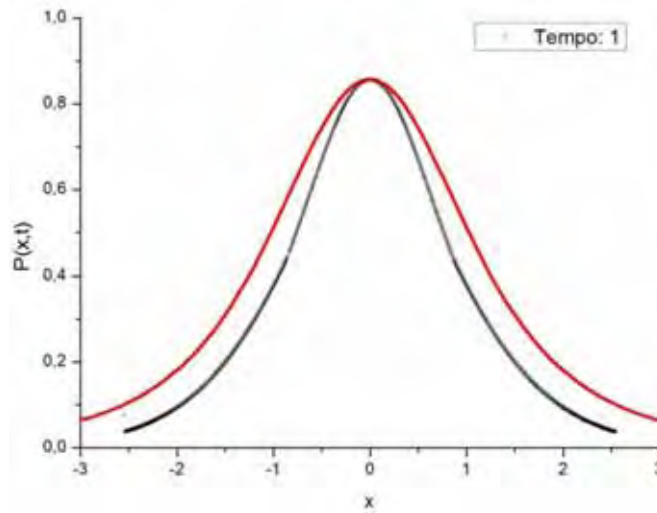


Figura 25: Gráfico de $P(x,t)$ para $t=1$, comparando o resultado numérico com (6.2.7).

Como na figura 24 a linha vermelha na figura 25 representa o gráfico feito através da solução analítica da EFPNL e a linha preta o conjunto de pontos obtidos pela eliminação de Gauss. Comparando as duas, vemos que há uma sobreposição da região central e um afastamento das regiões laterais.

O mesmo comportamento de $t = 1$ é observado para tempos maiores (3 e 5 unidades) na figura 26.

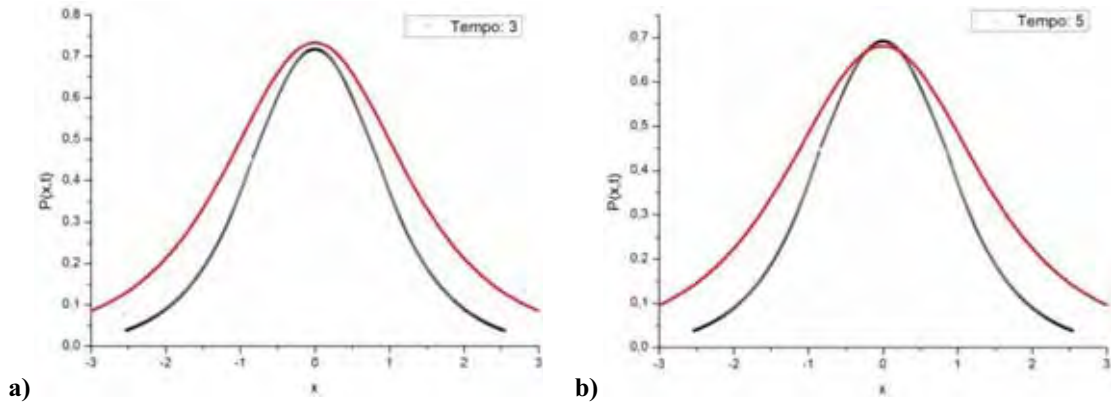


Figura 26: Comparação entre $P(x,t)$ obtido a partir da eq. (6.2.7) e o resultado fornecido pelo algoritmo para t maiores

Para $t = 3u$ a diferença entre as curvas é, aproximadamente, 0,03 e quando $t = 5u$ esta diferença em $x = 0$ é de 0,02, já as regiões laterais dos dois gráficos da figura 26 apresentam um distanciamento maior da curva analítica que o observado na fig. 25.

7. Conclusão

Neste trabalho é apresentada a equação de Fokker-Planck linear e não linear desde a sua obtenção até seus respectivos métodos de solução, considerando sistemas particulares.

Para a equação de Fokker-Planck linear (1.1) o método de solução proposto, capítulo 2, se mostra eficaz para resolver a EFP para sistemas em que a equação de Schroedinger associada possui parte da solução discreta e parte contínua. Os casos estudados atestam a viabilidade da abordagem introduzida aqui.

Devido à condição inicial adotada, obtém-se que em um instante muito próximo do inicial, a distribuição de probabilidade se aproxima de uma função delta (vide figuras 2a e 5a no capítulo 2). Com o decorrer do tempo $P(x,t)$ demonstra um alargamento da curva e redução do pico ao redor da posição central. Essa evolução temporal ocorre até o sistema atingir o estado estacionário.

Os resultados obtidos no capítulo 2 mostram que para pequenos valores de t (figura 2a e 5a) a diferença entre a solução numérica e analítica é bastante pronunciada. Essa diferença pode ser atribuída diretamente à limitação da abordagem numérica adotada. Entretanto, para valores maiores de tempo há uma concordância melhor entre os resultados.

Considerando agora da EFPNL, como pode ser observado, a solução analítica de (1.3) ocorre através do uso de um *ansatz* que é ajustado ao problema em questão. Infelizmente, há poucos casos que permitem a aplicação de um *ansatz*, por exemplo, o potencial com barreira mostrado no capítulo 4. Para resolver a equação diferencial foi necessário acrescentarmos um termo extra a expressão (1.3) tornando-a solúvel.

O gráfico feito do *ansatz* sugerido mostra um comportamento esperado do sistema, isto é, conforme o tempo passa há uma tendência das partículas irem de uma região de maior potencial para uma de menor.

Este processo de difusão é favorecido não somente pelo fator de não linearidade da equação de Fokker-Planck, mas também pela adição do termo de fonte $\mu(t)$ que favorece as partículas transporem a barreira. A incorporação desta função na EFPNL permite a sua solução para um sistema simples de potencial de barreira, na literatura há

poucos modelos solúveis, dificultando a aplicação do formalismo não extensivo no estudo de processos químicos ou biológicos.

A grande vantagem de obter soluções analíticas é poder observar de forma geral o comportamento do sistema em qualquer intervalo de tempo. Embora o método numérico apresentado aqui forneça esta informação, ela não é precisa, pois cada vez que a distribuição de probabilidade é calculada há a soma de um erro numérico acrescido nos resultados.

Por mais acurado que seja o método, ainda sim, para grandes intervalos de tempo, isto é, grande número de interações ocorre a presença de um erro numérico nos resultados que provoca uma diferença entre o gráfico feito a partir dos resultados numéricos e o construído com a solução analítica (capítulo 6). O método numérico aplicado a uma EFPL exibiu pouca diferença do resultado em comparação com a solução analítica, contudo para a EFPNL houve um grande acréscimo de erro numérico com o aumento do tempo.

Embora, a aplicação do método de diferenças finitas tenha apresentado uma diferença em relação a solução teórica ele mostrou ser de grande valia, porque mostrou valores próximos dos esperados para o ponto de máximo da probabilidade ($x = 0$) e um decaimento com o tempo semelhante, abrindo caminho para estudar maneiras de refinar estes resultados obtidos, aproximando mais as curvas.

Os gráficos apresentados no capítulo 5, mais especificamente as figuras 12, 15 e 17 que mostram a distribuição de probabilidade em diferentes intervalos de tempo para diferentes valores de ν , indicam como o parâmetro não linear influencia no comportamento do sistema. As distribuições de probabilidade obtidas solucionando a equação (1.3), por exemplo, as apresentadas no capítulo 4, podem ser utilizadas para obter mais informações sobre o sistema estudado. É possível definir desde o percurso médio de moléculas ao grau de organização (entropia) e energia livre que o sistema possui com o decorrer do tempo.

Modelos biológicos, geralmente são tratados de maneira mais simples possível, desconsiderando varias interações que a priori, não interferem de forma direta no comportamento deste [39 - 41]. Um exemplo é o processo de enovelamento de proteínas utilizando análise computacional que para facilitar o processo computacional desconsidera as interações de longo alcance entre átomos da cadeia. Embora estas simplificações não afetem o comportamento do sistema, elas acabam fornecendo uma

idéia aproximada de como é a cinética do processo. Baseado nisto, o parâmetro não linear, pode servir de ajuste entre os resultados teóricos e os observáveis experimentalmente, gerando uma informação mais refinada do que está ocorrendo, sendo o grande problema, realmente, encontrar maneiras mais simplificadas e novos tipos de força que dêem a solução da EFPNL

Referências:

- [1] REIF F., **Fundamentals of Statistical and Thermal Physics**, New York, McGRAW-Hill International Editions, (1985).
- [2] TOMÉ T., OLIVEIRA M. J., **Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade**, São Paulo, Edusp, (2001).
- [3] RISKEN H., **The Fokker-Planck Equation: Method of Solution and Applications**, 2^a ed., Berlim, Springer, (1989).
- [4] PETERS, M. H. Fokker-Planck equation and the grand molecular friction tensor for coupled rotational and translational motions of structured Brownian particles near structured surfaces, Jour. Chem. Phys., v. 110, p. 528 – 538, 1999.
- [5] CURTISS, C. F. e BIRD, R. B. Fokker–Planck equation for the one-molecule distribution function in polymer mixtures and its solution, Jour. Chem. Phys., v. 106, p. 9899 – 9921, 1997.
- [6] TOMÉ, T. Entropy Production in Nonequilibrium Systems Described by a Fokker-Planck Equation, Braz. Jour. Phys., v. 36, n. 4A, p. 1285 – 1289, 2006.
- [7] COHEN, E. G. D. Statistics and dynamics, Physica A, v. 305, 19 – 26, 2002.
- [8] TSALLIS, C. Nonextensive Statistics - Theoretical, Experimental and Computational, Braz. Jour. Phys., v. 29, n. 1, p. 1 – 35, 1999.
- [9] FRANK T. D. **Nonlinear Fokker-Planck Equations**, Berlim, Springer, (2005).
- [10] PEDRON, I. T. e MENDES, R. S. Difusão anômala e equações generalizadas de difusão, Rev. Bras. Ens. Fís., v. 27, n. 2, p. 251 - 258, 2005
- [11] ADLER, R. S. An application of the generalized Fokker-Planck equations to the dynamics of dilute polymer solution, J. Chem. Phys., v. 69, p. 2849 – 2863, 1978.
- [12] OTT, A. et al. Anomalous Diffusion in “Living Polymers”: A Genuine Levy flight?, Phys. Rev. Lett., v. 65, n. 17, p. 2201 – 2204, 1990.
- [13] BORLAND, L. Microscopic dynamics of the nonlinear Fokker-Planck equation: A phenomenological model, Phys. Rev. E, v. 57, n. 6, p. 6634 – 6642, 1998.
- [14] TATSUAKI, W. e TAKESHI, S. When non-extensive entropy becomes extensive, Phys. A, v. 301, p. 284 – 290, 2001.
- [15] TSALLIS C., **Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics**, Rio de Janeiro, Springer, (2009).

- [16] CUNHA M. C. C., **Métodos numéricos**, Campinas, ed. Unicamp, 2000.
- [17] BURDEN R. L., FAIRES J. D., **Análise numérica**, Boston, 5 ed., Pioneira Thomson Learning, 2003.
- [18] PEDRON, I. T. **Estudos em Difusão Anômala**. 2003. 97f. Tese (Doutorado) – Universidade Estadual de Maringá, Maringá, 2003.
- [19] LEE, K. e SUNG, W. Ion transport and channel transition in biomembranes, Phys. A, v. 315, p. 79 – 97, 2002.
- [20] REICHL, L. E. **A Modern Course in Statistical Physics**, 2 ed., New York, Wiley-Interscience, 1988.
- [21] AMES, W. F., **Numerical methods for partial differential equations**, 3 ed., Boston, Academic Press INC., 1992.
- [22] TATARI, M., DEHGHAN, M. e RAZZAGHI, M. Application of the Adomian decomposition method for the, Math. and Comp. Model., v. 45, p. 639 – 650, 2007.
- [23] DAVIES, M. Simple Potential Functions and the Hydrogen Halide Molecules, Jour. Chem. Phys., v. 17, n. 04, 1949.
- [24] OYEWUMI, K. J., e AKOSHILE, C. O., Bound-state solutions of the Dirac-Rosen-Morse potential with spin and pseudo spin symmetry, Eur. Phys. J. A, v. 45, 311 – 318, 2010.
- [25] POLOTTO, F., ARAUJO, M. T. e DRIGO FILHO, E., Solutions of the Fokker-Planck equation for a Morse isospectral potential, J. Phys. A: Math. Theor., v. 43, n. 1, 9 pp., 2010.
- [26] SCHIFF, L. I. **Quantum Mechanics**, 3 ed., New York, McGraw-Hill, 1968.
- [27] NIETO, M. M. e SIMONS Jr., L. M. Coherent States for General Potentials, Phys. Rev. Let., v. 41, n. 4, p. 207 – 210, 1978.
- [28] SHIINO, M. Free energies based on generalized entropies and H-theorems for nonlinear Fokker-Planck equations, Jour. Math. Phys., v. 42, n. 06, p. 2540 – 2553, 2001.
- [29] BORLAND, L. et al. The nonlinear Fokker-Planck equation with state-dependent diffusion: a nonextensive maximum entropy approach, Eur. Phys. J. B, v. 12, p. 285 – 297, 1999.
- [30] PLASTINO, A. R. e PLASTINO, A. Non-extensive statistical mechanics and generalized Fokker-Planck equation, Physica A, v. 222, p. 347 – 354, 1995.

- [31] SJÖBERG, P. **Numerical Solution of the Fokker-Planck Approximation of the Chemical Master Equation**. 2005. 104f. Dissertação (Licenciatura) – Uppsala University, Suécia, 2005.
- [32] RICHTMYER, R. D. **Difference Methods for Initial-value Problems**, 1st ed., New York, Interscience Publishers, 1957.
- [33] VEMULAPALLI, G. K. **Physical Chemistry**, New Jersey, Prentice-Hall Inc. A Simon & Schuster Company Englewood Cliffs, 1993.
- [34] DRAZER, G., WIO, H. S. e TSALLIS, C., Anomalous diffusion with absorption: Exact time-dependent solutions, *Phys. Rev. E*, v. 61, n. 02, p. 1417 – 1422, 2000.
- [35] PEDRON, I. T. et al. Nonlinear anomalous diffusion equation and fractal dimension: Exact generalized Gaussian solution, *Phys. Rev. E*, v. 65, p. 1 – 6, 2002.
- [36] CRANK, J. **The Mathematics of Diffusion**, London, Oxford University Press, 1956.
- [37] HANSEN, C. M. The significance of the surface condition in solutions to the diffusion equation: explaining “anomalous” sigmoidal, Case II, and Super Case II absorption behavior, *Eur. Polym. J.*, v. 46, p. 651 – 662, 2009.
- [38] SMITH, G. D. **Numerical solution of partial differential equations: Finite Difference Methods**, New York, Oxford University Press, 1985.
- [39] MORET, M. A. et al. Stochastic strategy to analyze protein folding, *Physica A*, v. 353, p. 353 – 364, 2005.
- [40] MORET, M. A., et al. New stochastic strategy to analyze helix folding, *Biophys. J.*, v. 82, p. 1123 – 1132, 2002.
- [41] NIVEN, R. K. q -Exponential structure of arbitrary-order reaction kinetics, *Chem. Eng. Sci.*, v. 61, p. 3785 – 3790, 2006.