

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Integrais, Equações Diferenciais e Entropia de Tsallis

Isabel Tamara Pedron

Dissertação de Mestrado
submetida ao Departamento de
Física da Universidade Estadual de
Maringá

ORIENTADOR: Prof. Dr. Renio dos Santos Mendes

Maringá
1.999

ABSTRACT

In this work we studied nonlinear differential equations and integrals by using nonextensive concepts related to the Tsallis entropy. More precisely, a family of nonlinear ordinary differential equations with arbitrary order is obtained. Applications of these equations are given here. In particular, a connection between Tsallis entropy and the one-dimensional correlated anomalous diffusion equation is established. It is also developed explicitly a WKB-like method for second order equations and it is applied to solve approximately a class of equations that contains as a special case the Thomas-Fermi equation for an atom. In order to calculate approximately integrals, generalized saddle-point, variational and perturbative methods are developed as well. It is expected that the present ideas can be useful in the discussion of nonextensive contexts and related ones.

RESUMO

Neste trabalho estudamos equações diferenciais não lineares e integrais usando conceitos relacionados à entropia de Tsallis. Mais precisamente, é obtida uma família de equações diferenciais não lineares de ordem arbitrária. Aplicações destas equações são apresentadas. Em particular, é estabelecida uma conexão entre a entropia de Tsallis e a equação de difusão anômala correlacionada unidimensional. Uma generalização do método WKB é desenvolvida explicitamente, a qual é aplicada para resolver, aproximadamente, uma classe de equações que contém a equação de Thomas-Fermi para um átomo como caso especial. Com o objetivo de efetuar cálculos aproximados de integrais, são desenvolvidas generalizações dos métodos ponto de sela, variacional e perturbativo. Espera-se que as idéias aqui apresentadas possam ser úteis na discussão de contextos não extensivos.

Para o Lucas

“ Disputar
Em cada frequência
Um espaço nosso
Nessa decadência...”

(RPM)

Agradecimentos

Ao orientador, Dr. Renio dos Santos Mendes, pela realização deste trabalho. Paciência quase infinita, convergência absoluta para o saber.

À coordenação do curso de mestrado, representada pelo Dr. Mauro L. Baesso, e a todos os professores do curso e do departamento, pelo empenho no sucesso do programa de pós-graduação nesta instituição. Agradecimento especial ao professor Dr. Luiz R. Evangelista pelo apoio inicial.

Às colegas e aos colegas de curso, pela companhia e solidariedade nessa caminhada.

A Paulino Sato, pela retaguarda digital.

Aos funcionários do departamento pela sua disponibilidade sempre quando solicitados. Em particular á Akiko, da secretaria de mestrado.

A toda a minha família, especialmente a minha mãe, pelo apoio e dedicação. Muito obrigado a todos pela paciência no constante para frente...para trás...para frente...para trás...

A meu pai, que com certeza continua junto.

Ao povo brasileiro, através da CAPES, pelo apoio financeiro.

Conteúdo

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Introdução | 8 |
| 2 | Entropia de Tsallis e distribuição q | 14 |
| 2.1 | A distribuição de Boltzmann | 14 |
| 2.2 | A entropia de Tsallis | 18 |
| 2.3 | A distribuição q - (I) | 20 |
| 2.4 | A distribuição q (II) | 23 |
| 3 | Crescimento e decaimento não exponencial | 26 |
| 3.1 | Decaimento exponencial e extensividade | 26 |
| 3.2 | Decaimento não exponencial e não extensividade | 27 |
| 3.3 | Aplicações | 29 |
| 4 | Equações diferenciais não lineares baseadas na entropia de Tsallis | 32 |
| 4.1 | Família de equações não lineares com coeficientes constantes | 33 |
| 4.2 | A equação da difusão | 35 |
| 4.3 | Aplicação à difusão anômala correlacionada | 36 |
| 5 | Equações diferenciais não lineares com coeficientes não constantes e equação de Thomas-Fermi | 40 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 5.1 | Família de equações não lineares com coeficientes não constantes | 40 |
| 5.2 | Aproximação WKB | 42 |
| 5.3 | Generalização do método WKB | 43 |
| 5.4 | Aplicação à equação de Thomas-Fermi | 45 |
| 6 | Aproximação de integrais: método do ponto de sela generalizado | 48 |
| 6.1 | Método do ponto de sela | 49 |
| 6.2 | Método do ponto de sela generalizado | 51 |
| 6.2.1 | Aplicações | 54 |
| 7 | Aproximação de integrais: método variacional | 57 |
| 7.1 | Desigualdade de Bogoliubov | 57 |
| 7.1.1 | Aplicação | 60 |
| 7.2 | Desigualdade de Bogoliubov generalizada | 61 |
| 7.2.1 | Aplicação | 63 |
| 7.3 | Método perturbativo | 64 |
| 8 | Conclusão | 66 |
| A | O modelo de Thomas-Fermi | 69 |

Capítulo 1

Introdução

A mecânica estatística é a teoria básica subjacente à teoria fenomenológica da termodinâmica e tem como um dos seus objetivos explicar suas leis e resultados. A termodinâmica, por sua vez, sistematiza as leis empíricas sobre o comportamento térmico dos corpos macroscópicos e tira seus conceitos diretamente dos experimentos. Sua abordagem axiomática, baseada em postulados, está apresentada nos trabalhos pioneiros de Caratheódory [1] e Tisza [2]. Os postulados dizem basicamente que [3]:

I - Existem estados de equilíbrio macroscópico (para sistemas simples), completamente caracterizados pela energia interna, volume e número de moles das espécies químicas que constituem o sistema.

II - Existe uma entropia S , função dos parâmetros extensivos do sistema, que é máxima no estado de equilíbrio.

III - A entropia é uma função *contínua, diferenciável e monotonicamente crescente* da energia. É *aditiva (extensiva)* sobre os sub-sistemas constituintes.

IV - A entropia se anula no *Zero Absoluto*.

A mecânica estatística, por sua vez, se fundamenta na teoria de probabilidades aplicada sobre uma mecânica, a qual pode ser clássica ou quântica. Para entendermos melhor essa questão, notemos que o mundo microscópico é governado pelas leis da mecânica, porém o grande número de partículas nos corpos macroscópicos ($\sim 10^{23}/cm^3$) inviabiliza a avaliação dos dados iniciais, como por exemplo, posições e velocidades iniciais das partículas, dados que a dinâmica requer. Este tipo de questão indica que uma descrição viável dos sistemas macroscópicos deve passar por uma abordagem probabilística. É importante ressaltar que a mecânica estatística não reformula ou transforma a dinâmica microscópica, mas ela fornece regras para fazer previsões sobre o sistema sem todos os dados necessários no método dinâmico.

Quando se compreende que os fenômenos térmicos são manifestações macroscópicas da dinâmica microscópica, fica nítida a conexão entre a termodinâmica e a microdinâmica. A mecânica estatística permite então mudar de um nível de descrição macroscópico para um nível microscópico. Boltzmann estabeleceu uma conexão (~ 1872) quando propôs a famosa expressão para a entropia, $S = k \log W$, formulando pela primeira vez a visão microscópica da termodinâmica. Posteriormente, Gibbs trouxe contribuições fundamentais para a teoria, introduzindo, por exemplo, o conceito de *ensemble*.

A termoestatística de Boltzmann-Gibbs (B-G) constitui uma ferramenta poderosa para previsões em sistemas usuais, mais precisamente quando vale a extensividade termodinâmica, isto é, nos casos em que as interações microscópicas podem ser desprezadas ou são de curto alcance e quando a memória microscópica é de curta duração ou não existe. A presença de forças de longo alcance causa modificações importantes na termodinâmica, muitas delas ainda não devidamente investigadas [4]. Por exemplo, o conceito de sis-

tema isolado (sistema que não troca matéria, energia ou informação com sua vizinhança), essencial na teoria de B-G, é uma idealização apropriada quando as interações forem de curto alcance e portanto decaindo rapidamente com a distância. Separar estes sistemas torna as interações tão fracas que podem ser desprezadas, aproximando-os de sistemas isolados ideais. Por outro lado, a presença de interações de alcance suficientemente longo pode ser significativa, e estas não podem ser desprezadas. Neste caso, seria praticamente impossível separar completamente (isolar) sistemas interagentes. Além disso, quando estas interações são relevantes, os parâmetros termodinâmicos podem perder seu caráter extensivo ou intensivo.

O formalismo de B-G pode então falhar em sistemas que incluem forças de longo alcance e efeitos de memória de longa duração. Na mesma direção, a presença de uma estrutura fractal pode conduzir a uma situação onde tal formalismo não seja adequado. Assim, somas ou integrais usuais que aparecem em quantidades termoestatísticas relevantes (como, por exemplo, função de partição, energia interna, entropia, deslocamento quadrático médio) podem divergir. Isso implicaria a ausência de uma prescrição matemática bem comportada para cálculos de quantidades normalmente usadas para caracterizar o sistema (como, por exemplo, calor específico, susceptibilidade, difusividade) e impossibilitaria a comparação com dados experimentais, que são sempre finitos. Estas dificuldades são bem conhecidas em sistemas gravitacionais [5, 6], magnéticos [7], difusão anômala de Lévy [8], bem como em alguns problemas de tensão superficial [9], sistemas granulares [10], neutrinos solares [11], velocidade peculiar de galáxias [12], entre outros.

Um possível caminho teórico para ampliar o limite de validade da termoestatística de B-G tem sido traçado tomando como base a entropia de Tsallis [13, 14]. Para se generalizar uma teoria é necessário violar pelo menos um

dos seus postulados. A entropia generalizada de Tsallis viola a aditividade (parte do terceiro postulado), que veremos com detalhe no capítulo 2. Esta propriedade conduz a uma mecânica estatística generalizada cujo formalismo está estruturado sobre dois objetos básicos: a forma entrópica S_q e um valor médio generalizado para os observáveis. Nesse formalismo, a mecânica estatística de B-G está contida na mecânica estatística generalizada como um caso particular. Mais precisamente, no limite $q \rightarrow 1$ a termoestatística de B-G é reobtida, onde q é um parâmetro característico presente na entropia de Tsallis.

De uma maneira geral, a entropia de Tsallis não é extensiva. Esta propriedade tem sido um ingrediente básico para empregar uma mecânica estatística baseada em sua estrutura para descrever sistemas interagentes do tipo previamente descritos. Por exemplo, este formalismo vem sendo aplicado em muitos contextos, tais como superdifusão anômala do tipo Lévy [15], difusão anômala do tipo correlacionado [16], turbulência de Euler [17], sistemas auto-gravitantes [18, 19, 20, 21], radiação cósmica de fundo [22], velocidades peculiares de galáxias espirais [23], teoria da resposta linear [24], interação elétron-fônon [25], sistemas ferro-fluidos [26], sistemas dissipativos com baixa dimensão [27] e hamiltonianos sensitivos às condições iniciais [28], entre outros.

Como ficará mais claro no decorrer desta apresentação, a não extensividade que permeia os temas relacionados à entropia de Tsallis deve conduzir à generalizações, quando comparados ao contexto extensivo. Um bom exemplo disto é o caso da equação que descreve um decaimento radioativo, $dy/dt = -\lambda y$. Como veremos, uma generalização desta equação, baseada na entropia de Tsallis, é $dy/dt = -\lambda y^q$. Por este exemplo podemos perceber que o comportamento não extensivo é manifestado na transformação de uma

equação linear em outra não linear. Este tipo de generalização, assim como algumas de suas aplicações, é um dos temas desenvolvidos no nosso trabalho. Mais precisamente, analisaremos a generalização de certas equações lineares, a qual será aplicada ao movimento de uma partícula num meio viscoso, à cinética química, à difusão anômala correlacionada e à equação de Thomas-Fermi. Para o caso desta última equação será previamente desenvolvida uma generalização do método WKB.

Outra questão que estudaremos é a aproximação de integrais baseada na mecânica estatística não extensiva oriunda da entropia de Tsallis. Neste contexto, serão desenvolvidos dois procedimentos: o primeiro é basicamente uma generalização do método do ponto de sela e o segundo utiliza um procedimento variacional baseado numa generalização da desigualdade de Bogoliubov. Na mesma linha será discutido também o método perturbativo.

Esta monografia está dividida em oito capítulos. No segundo capítulo é apresentada uma breve revisão da mecânica estatística generalizada baseada na entropia de Tsallis. No capítulo 3, obtemos uma generalização da equação de decaimento (crescimento) exponencial, que é aplicada ao movimento de uma partícula em meio viscoso e à cinética química. No capítulo 4, construímos uma família de equações não lineares com coeficientes constantes, baseada na generalização do capítulo anterior. É feita, então, uma aplicação visando obter uma conexão entre a difusão anômala correlacionada e a entropia de Tsallis. No quinto capítulo, a família obtida anteriormente é estendida para o caso de coeficientes não constantes. Neste contexto, desenvolvemos um procedimento que generaliza o método de aproximação WKB. A seguir, este procedimento é aplicado para resolver a equação de Thomas-Fermi para um átomo neutro. Os capítulos 6 e 7 são dedicados à generalização de métodos para efetuar cálculo aproximado de integrais. No primeiro, é de-

envolvida uma generalização do método do ponto de sela ao longo do eixo real (também conhecido como método de Laplace), o qual será aplicado no cálculo de integrais cujos integrandos não podem ser aproximadas por uma gaussiana. No capítulo seguinte levamos a efeito um método de aproximação, de caráter variacional, o qual se fundamenta numa generalização da desigualdade de Bogoliubov. Também será discutido, brevemente, um procedimento perturbativo para o cálculo de integrais. Finalmente, no oitavo e último capítulo, apresentamos uma discussão e conclusões sobre os temas desenvolvidos neste trabalho.

Capítulo 2

Entropia de Tsallis e distribuição q

Antes de iniciar a discussão das questões que motivaram o presente trabalho, é conveniente fazer uma apresentação de alguns aspectos básicos que permeiam todos os desenvolvimentos posteriores. Neste sentido, este capítulo é dedicado a uma breve discussão sobre a entropia generalizada de Tsallis e algumas de suas implicações.

Para enfatizar que a entropia de Tsallis e as distribuições de probabilidades vinculadas a ela são generalizações do caso usual, é feita uma apresentação introdutória sobre a entropia de Boltzmann-Gibbs-Shannon e os *ensembles* canônico e microcanônico.

2.1 A distribuição de Boltzmann

A introdução de uma mecânica estatística pode ser baseada na adoção de uma forma entrópica S e num conjunto de vínculos fisicamente apropriados.

Além disso, em qualquer estado final de equilíbrio termodinâmico a entropia deve ser máxima. Esse postulado de maximização está intimamente ligado a uma questão fundamental: a estabilidade térmica da matéria. Matematicamente, esse postulado conduz a um princípio variacional que dá origem a vários desdobramentos. Em particular, as probabilidades relativas aos diversos estados de um sistema devem ser tais que maximizam a sua entropia.

Nesse contexto, a entropia de Boltzmann-Gibbs-Shannon, B-G-S [29],

$$S = -k \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i \quad , \quad (2.1)$$

ocupa um papel fundamental na mecânica estatística usual, onde $\{p_i\}$ são as probabilidades associadas aos W estados acessíveis ao sistema em estudo e k representa a constante de Boltzmann.

Uma importante propriedade dessa entropia se refere à regra de aditividade. Para verificá-la, consideremos dois sistemas independentes A e B , sendo $\{p_i^{(A)}\}$ e $\{p_j^{(B)}\}$ os respectivos conjuntos de probabilidades. Nesse caso, vale para o sistema resultante da composição $A \cup B$ a relação

$$p_{ij}^{(A \cup B)} = p_i^{(A)} p_j^{(B)} \quad . \quad (2.2)$$

A entropia do sistema total é dada, então, por

$$\begin{aligned} S^{(A \cup B)} &= -k \sum_{i,j} p_i^{(A)} p_j^{(B)} \ln p_i^{(A)} p_j^{(B)} \\ &= -k \sum_i p_i^{(A)} \ln p_i^{(A)} - k \sum_j p_j^{(B)} \ln p_j^{(B)} \quad , \end{aligned}$$

ou seja

$$S^{(A \cup B)} = S^{(A)} + S^{(B)} \quad . \quad (2.3)$$

Quando consideramos um sistema macroscópico com interações de curto alcance, seus subsistemas (também macroscópicos) interagem muito fracamente, fazendo com que a relação (2.2) seja uma excelente aproximação. Assim, entropia do conjunto é a soma das entropias de cada subsistema, satisfazendo o postulado III apresentado no capítulo 1.

Passemos agora à maximização de $S(p_i)$ em relação ao conjunto $\{p_i\}$, respeitando os vínculos

$$\alpha = \sum_{i=1}^W p_i \quad (2.4)$$

e

$$\gamma = \sum_{i=1}^W x_i p_i . \quad (2.5)$$

Utilizando o método dos multiplicadores de Lagrange [30], construímos a função auxiliar

$$R(p_i) = - \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i + \lambda_1 \left(\alpha - \sum_{i=1}^W p_i \right) + \lambda_2 \left(\gamma - \sum_{i=1}^W x_i p_i \right) . \quad (2.6)$$

A extremização de $R(p_i)$ em relação a p_i nos permite escrever

$$\frac{\partial R(p_i)}{\partial p_j} = \ln p_j + 1 + \lambda_1 + \lambda_2 x_j = 0 , \quad (2.7)$$

que implica

$$p_i = C \exp(-\lambda x_i) , \quad (2.8)$$

com $C = \exp(-\lambda_1 - 1)$ e $\lambda = \lambda_2$. Deve-se ressaltar que a escolha $\alpha = 1$, na eq.(2.4), conduz a uma distribuição de probabilidade normalizada, e nesse caso, $C = 1/\sum_{i=1}^W \exp(-\lambda x_i)$. Na sequência deste trabalho, em geral, essa

escolha não é necessária. Sendo assim, não fixaremos a priori o valor de α (veja, por exemplo, os capítulos 3 e 4).

Considerando $x_i \rightarrow \epsilon_i$ como o valor particular da energia de cada microestado, e $\lambda \rightarrow \beta = 1/kT$, então o conjunto dos microestados $\{i\}$ constitui o *ensemble* canônico, conjunto dos estados acessíveis ao sistema em contato com um reservatório térmico a uma temperatura T . Assim, a respectiva probabilidade p_i , dada pela eq. (2.8), é

$$p_i = \frac{\exp(-\beta\epsilon_i)}{Z} , \quad (2.9)$$

onde

$$Z = \sum_{i=1}^W \exp(-\beta\epsilon_i) \quad (2.10)$$

é a função de partição do sistema. Nesse caso, $\gamma = U$ representa a energia interna média do sistema macroscópico. Relações importantes podem ser obtidas das expressões acima. Por exemplo, para a energia interna e para energia livre, $F = U - TS$, temos

$$U = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z . \quad (2.11)$$

e

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z , \quad (2.12)$$

respectivamente.

A expressão (2.5) representa também a forma padrão para o cálculo do valor médio (valor esperado) de qualquer observável arbitrário O na estatística usual

$$\langle O \rangle = \sum_{i=1}^W O_i p_i \quad (2.13)$$

Quando o sistema estiver isolado, sujeito apenas ao vínculo (2.4), com $\alpha = 1$, teremos o *ensemble* microcanônico. Seguindo o procedimento que conduziu à eq. (2.8), porém sem a contribuição relativa à λ_2 , a probabilidade do sistema ser encontrado em um microestado i será dada simplesmente por

$$p_i = \frac{1}{W} . \quad (2.14)$$

Assim, a probabilidade para qualquer um dos microestados do conjunto é a mesma, isto é, todos os estados são igualmente prováveis. A noção de probabilidades iguais pode ser interpretada como uma “inexistência de conhecimento *a priori*” e representa nossa total ignorância sobre o sistema. A desinformação a respeito do conjunto de eventos é máxima. A entropia de B-G-S assume então, para o *ensemble* microcanônico, a forma

$$S = k \log W \quad (2.15)$$

que é o valor máximo para a entropia (2.1), sujeita ao vínculo (2.4) e com $\alpha = 1$.

2.2 A entropia de Tsallis

Podemos generalizar a eq. (2.1) de tal forma que essa nova entropia possa exibir um caráter não-extensivo. Para isso vamos considerar a interessante proposta de entropia feita por Tsallis [13],

$$S_q = k \frac{1 - \sum_{i=1}^W (p_i)^q}{q - 1} \quad (q \in \mathcal{R}) . \quad (2.16)$$

No limite $q \rightarrow 1$, verifica-se facilmente que S_q reduz-se à entropia de B-G-S, ou seja

$$S_1 = \lim_{q \rightarrow 1} k \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i (p_i)^{q-1}}{q - 1} = \lim_{q \rightarrow 1} k \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i \exp((q - 1) \ln p_i)}{q - 1}$$

e, expandindo a exponencial em séries de potências de $(q - 1)$, podemos concluir que

$$S_1 = \lim_{q \rightarrow 1} k \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i (1 + (q - 1) \ln p_i + \dots)}{q - 1} = -k \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i .$$

Além de conter a entropia de B-G-S como caso limite, a entropia de Tsallis apresenta várias outras propriedades. A entropia S_q é positiva definida. De fato, se $q > 1$, temos $p_i^q < p_i$ e $\sum p_i^q < \sum p_i = 1$, o que implica $S_q \geq 0$. Da mesma forma, se $q < 1$, temos $p_i^q > p_i$ e $\sum p_i^q > \sum p_i = 1$ e novamente $S_q \geq 0$. A entropia S_q também tem concavidade definida, mais precisamente, ela é côncava para $q > 0$ (somente um máximo) e convexa para $q < 0$ (somente um mínimo). S_q é expansível para $q > 0$, $S_q(p_1, p_2, \dots, p_w) = S_q(p_1, p_2, \dots, p_w, 0)$, ou dito de outra forma, podemos expandir o conjunto de possibilidades e a entropia não se altera, desde que a possibilidade acrescentada tenha probabilidade zero. Generaliza ainda a aditividade (que veremos a seguir) e a aditividade de Shannon. Todas as propriedades citadas podem ser verificadas em [13, 31].

A não extensividade da entropia (2.16) se manifesta na regra de (pseudo) aditividade. Sejam dois sistemas independentes A e B com $\{p_i^{(A)}\}$, $\{p_j^{(B)}\}$ os respectivos conjuntos de probabilidades. Novamente, considerando o caso em que essas probabilidades não são correlacionadas, podemos empregar a eq. (2.2). Assim, a entropia do sistema final é dada por

$$\begin{aligned} S_q^{(A \cup B)} &= \frac{1 - \sum_{i,j} (p_i)^q (p_j)^q}{q - 1} \\ &= \frac{1 - \sum_i (p_i)^q}{q - 1} + \frac{1 - \sum_j (p_j)^q}{q - 1} - \frac{(1 - \sum_i (p_i)^q)(1 - \sum_j (p_j)^q)}{q - 1} , \end{aligned}$$

ou seja

$$S_q^{(A \cup B)} = S_q^{(A)} + S_q^{(B)} + (1 - q) S_q^A S_q^B . \quad (2.17)$$

O índice entrópico q caracteriza então o grau de não extensividade da entropia (2.16). Visto que em todos os casos $S_q \geq 0$, temos que $q > 1$ corresponde à subextensividade, pois $S^{(A \cup B)} < S^{(A)} + S^{(B)}$. Analogamente a superextensividade está relacionada a $q < 1$, pois $S^{(A \cup B)} > S^{(A)} + S^{(B)}$ e quando $q = 1$ a extensividade é recuperada. Em resumo, a entropia de Tsallis (2.16) introduz algum tipo de interconexão entre as partes do sistema. Dizendo de outra forma, a violação da aditividade rompe, em certo sentido, o conceito de sistema isolado.

2.3 A distribuição q - (I)

Vamos maximizar (2.16) mantendo o vínculo (2.4) inalterado, porém mudando o vínculo (2.5) para

$$\gamma_q = \sum_{i=1}^W x_i (p_i)^q . \quad (2.18)$$

Seguindo o mesmo procedimento empregado para a entropia B-G-S, temos

$$R(p_i) = \frac{1 - \sum_{i=1}^W (p_i)_q}{q - 1} + \lambda_1 \left(\alpha - \sum_{i=1}^W p_i \right) + \lambda_2 \left(\gamma_q - \sum_{i=1}^W x_i (p_i)^q \right)$$

e

$$\frac{\delta R(p_i)}{\delta p_j} = \frac{q p_j^{q-1}}{q - 1} + \lambda_1 + \lambda_2 x_j q p_j^{q-1} = 0 ,$$

conduzindo a

$$p_i = C_q [1 - (1 - q) \lambda x_i]^{1/(1-q)} . \quad (2.19)$$

Nesta expressão, $C_q = [\lambda_1(1 - q)/q]^{1/(q-1)}$ e $\lambda = \lambda_2$. Com $\alpha = 1$ no primeiro vínculo, p_i representa a distribuição de probabilidade q com $C_q =$

$1/\sum_i^W [1 - (1 - q) \lambda x_i]^{1/(1-q)}$. Da mesma forma, com $x_i \rightarrow \epsilon_i$ e $\lambda \rightarrow \beta = 1/kT$,

$$p_i = \frac{1}{Z_q} [1 - (1 - q) \beta \epsilon_i]^{1/(1-q)} \quad (2.20)$$

representa a forma da distribuição q para o *ensemble* canônico e

$$Z_q = \sum_i^W [1 - (1 - q) \beta \epsilon_i]^{1/(1-q)} \quad (2.21)$$

representa a função de partição generalizada. Ainda, $\gamma_q = U_q$ é a energia interna média do sistema, que pode ser obtida de Z_q através da relação

$$U_q = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{Z_q^{1-q} - 1}{1 - q} \right) . \quad (2.22)$$

Além disso, a energia livre generalizada, $F_q = U_q - TS_q$, será dada por

$$F_q = -\frac{1}{\beta} \frac{Z_q^{1-q} - 1}{1 - q} . \quad (2.23)$$

No caso particular do *ensemble* microcanônico, à semelhança do caso usual, temos $p_i = 1/W$, e portanto

$$S_q = k \frac{1 - \sum_{i=1}^W 1/W^q}{q - 1} = k \frac{1 - W^{1-q}}{q - 1} . \quad (2.24)$$

Por esta expressão, vemos que S_q é monotonicamente crescente com W , para $q < 1$, e se aproxima-se assintoticamente de um valor limite para $q > 1$. Além disso, a eq. (2.24) representa o valor máximo (mínimo) da entropia (2.16) para $q > 0$ ($q < 0$), quando empregamos apenas o vínculo (2.4).

Postulando a entropia (2.16) e o vínculo (2.18), Tsallis propôs uma mecânica estatística generalizada que no limite $q \rightarrow 1$ recupera a mecânica estatística usual. Propriedades importantes como a estrutura termodinâmica de Legendre, o teorema H (irreversibilidade do tempo macroscópico), o

teorema de Ehrenfest (princípio de correspondência), entre outras, são q -invariantes [13, 31, 32].

A distribuição (2.20), veja figura (2.1), apresenta propriedades interessantes, tais como:

- a) Ela recupera a distribuição de Boltzman no limite $q \rightarrow 1$, $p_i \propto \exp(-\beta\epsilon_i)$.
- b) A dependência em relação à energia obedece a uma lei de potência ao invés da exponencial usual, para $\epsilon_i \gg 1/\beta$ e $q > 1$.
- c) Para $q < 1$ apresenta um **corte** (probabilidades nulas para níveis de energia altos o suficientes para produzir um valor negativo na expressão $(1 - (1 - q)\beta\epsilon_i)$).

Além disso, a forma do vínculo na expressão (2.18) sugere que um observável genérico na teoria poderia comparecer nesta forma para o cálculo do valor médio generalizado,

$$O_q \equiv \langle O \rangle_q \equiv \sum_{i=1}^W O_i p_i^q . \quad (2.25)$$

Cabe ressaltar ainda que as probabilidades $\{p_i\}$ são genericamente números entre zero e um, então $p_i^q > p_i$ para $q < 1$ e $p_i^q < p_i$ para $q > 1$. Isso significa que eventos raros são privilegiados no cálculo dos valores médios quando $q < 1$ enquanto que $q > 1$ reforça eventos mais frequentes. Veja a tabela (2.1), onde este comportamento fica claro para valores definidos de p e q .

| | $q = 1$ | $q = 1/2$ | $q = 2$ |
|---------------|---------|---------------|---------|
| p_1^q | 1/2 | $1/\sqrt{2}$ | 1/4 |
| p_2^q | 1/8 | $1/2\sqrt{2}$ | 1/64 |
| $(p_1/p_2)^q$ | 4 | 2 | 16 |

Tabela 2.1
Uma comparação entre as probabilidades p_1 e p_2 elevadas à potência q , para valores típicos de p_1 , p_2 e q .

2.4 A distribuição q (II)

Apesar de não ser essencial na discussão dos próximos capítulos, mas por uma questão de informação, apresentaremos uma modificação do vínculo (2.18) que possibilita alguns avanços formais na teoria. Isso é possível porque a forma precedente de cálculo para o valor médio tem o inconveniente de apresentar um resultado inusitado para o valor médio da unidade, $\langle 1 \rangle_q =$

$\sum_i p_i^q \neq 1$, como se a não-extensividade da entropia implicasse um efetivo ganho ou perda de norma. Além disso, a distribuição (2.20) não é invariante através de uma translação uniforme do espectro de energia $\{\epsilon_i\}$, isto é, os resultados termodinâmicos dependem da escolha da origem das energias. Na prática pode ser escolhido $\epsilon_0 = 0$ como o estado fundamental de referência.

Esses últimos resultados podem ser contornados com outra possível escolha para o vínculo (2.18) [33], a saber

$$\tilde{\gamma}_q = \sum_i^W x_i P_i \quad (2.26)$$

com

$$P_i = \frac{p_i^q}{\sum_{j=1}^W p_j^q} , \quad (2.27)$$

implicando

$$\sum_{i=1}^W P_i = 1 . \quad (2.28)$$

A otimização da entropia S_q , seguindo o procedimento anterior e com $x_i \rightarrow \epsilon_i$ e $\tilde{\gamma}_q \rightarrow \tilde{U}_q$, leva agora a

$$\tilde{p}_i = \frac{1}{\tilde{Z}_q} \left[1 - (1 - q)\beta (\epsilon_i - \tilde{U}_q) / \sum_{j=1}^W (\tilde{p}_j)^q \right]^{1/1-q} , \quad (2.29)$$

onde

$$\tilde{Z}_q = \sum_{i=1}^W \left[1 - (1 - q)\beta (\epsilon_i - \tilde{U}_q) / \sum_{j=1}^W (\tilde{p}_j)^q \right]^{1/1-q} . \quad (2.30)$$

Essa última escolha para o segundo vínculo mantém todos os resultados termodinâmicos q -generalizados e apresenta feições mais familiares para alguns aspectos relativos à distribuição q .

Se for adicionado um valor constante ϵ_o a todo o conjunto $\{\epsilon_i\}$ do espectro, \tilde{U}_q torna-se então $\tilde{U}_q + \epsilon_o$. Isso deixa invariante a diferença $\{\epsilon_i - \tilde{U}_q\}$ na distribuição, o que por sua vez deixa invariante o conjunto de probabilidades $\{p_i\}$ sob uma translação no espectro de energia, e, portanto, todas as quantidades termodinâmicas. Além disso, a norma é conservada, já que o valor esperado de um observável O terá a forma

$$\tilde{O}_q \equiv \langle\langle O \rangle\rangle_q \equiv \sum_i O_i P_i = \frac{\sum_i O_i p_i^q}{\sum_i p_i^q}, \quad (2.31)$$

e agora é trivial mostrar que $\langle\langle 1 \rangle\rangle_q = 1$ para qualquer q .

Pode-se notar que, fatorando no numerador e no denominador a quantidade $[1 + (1 - q)\beta\tilde{U}_q / \sum_{i=1}^W (\tilde{p}_j)^q]^{1/(1-q)}$, na eq.(2.29), chegamos à relação

$$\tilde{p}_i = \frac{[1 - (1 - q)\tilde{\beta}\epsilon_i]^{1/(1-q)}}{\sum_{i=1}^W [1 - (1 - q)\tilde{\beta}\epsilon_i]^{1/(1-q)}}, \quad (2.32)$$

com β e $\tilde{\beta}$ relacionados por

$$\tilde{\beta} = \frac{\beta}{\sum_{j=1}^W (\tilde{p}_j)^q + (1 - q)\beta\tilde{U}}. \quad (2.33)$$

Portanto, comparando (2.20), (2.32) e (2.29) verificamos que $\tilde{p}_i(\beta) = p_i(\tilde{\beta})$. Então todos os desenvolvimentos obtidos com a escolha do vínculo (2.18) podem ser adaptados para incorporar a escolha (2.26), a qual mostra-se mais adequada para satisfazer os requisitos convencionais de uma distribuição de probabilidades.

Capítulo 3

Crescimento e decaimento não exponencial

Neste capítulo é apresentado, inicialmente, um procedimento para obter a equação de decaimento (crescimento) exponencial baseado na entropia de B-G-S. Empregando este mesmo procedimento, porém usando a entropia de Tsallis, obtemos uma generalização desta equação [34]. A seguir, a equação generalizada é aplicada ao caso do movimento de uma partícula em um meio fluido viscoso e à cinética química.

3.1 Decaimento exponencial e extensividade

Podemos facilmente estender o procedimento do capítulo anterior para o caso em que a variável x assume valores contínuos. Nesse caso, a entropia de B-G-S é escrita como

$$S = - \int_a^b p(x) \ln p(x) dx \quad (3.1)$$

e os vínculos tornam-se

$$\alpha = \int_a^b p(x) dx \quad (3.2)$$

e

$$\beta = \int_a^b x p(x) dx . \quad (3.3)$$

onde a e b delimitam a região onde a distribuição de probabilidade $p(x)$ está definida, $a \leq x \leq b$. Consequentemente, a distribuição que maximiza a entropia acima, sujeita a estes dois vínculos, é a distribuição exponencial

$$p(x) = p_o \exp(-\lambda x) . \quad (3.4)$$

onde p_o e λ são constantes que dependem dos parâmetros α e β . Verifica-se facilmente que essa distribuição satisfaz a equação do decaimento (crescimento) exponencial

$$\frac{dp}{dx} + \lambda p = 0 , \quad (3.5)$$

definida num intervalo arbitrário $a \leq x \leq b$ e satisfazendo a condição inicial $p(0) = p_o$.

Essa equação tem inúmeras aplicações e modela sistemas de caráter extensivo. Um exemplo é o decaimento radiativo de núcleos não interagentes. A desintegração de um núcleo não afeta o comportamento de outro e o comportamento do conjunto reflete o desconhecimento de cada núcleo em particular em relação ao processo ocorrido com os outros.

3.2 Decaimento não exponencial e não extensividade

A passagem para um caso não extensivo é imediata. Considerando o que foi discutido no capítulo e na seção anterior, a entropia de Tsallis pode ser escrita, no caso contínuo, como

$$S_q = - \int_a^b \frac{p(x) (1 - p(x)^{q-1})}{1 - q} dx . \quad (3.6)$$

ou, alternativamente, como

$$S_q = \frac{1 - \int_a^b p(x)^q dx}{q - 1} . \quad (3.7)$$

Quanto aos vínculos, o primeiro se mantém inalterado (ver eq. 3.2) e o segundo é reescrito como

$$\beta = \int_a^b x p(x)^q dx . \quad (3.8)$$

Assim, a distribuição que maximiza S_q sujeita aos vínculos (3.2) e (3.8) é

$$p(x) = p_o \left[1 - (1 - q) p_o^{q-1} \lambda x \right]^{1/(1-q)} , \quad (3.9)$$

que generaliza a distribuição exponencial.

A derivação direta dessa última expressão conduz a

$$\frac{dp(x)}{dx} = -\lambda p_o^q [(1 - (1 - q) p_o^{q-1} \lambda x)]^{q/(1-q)} ,$$

isto é, essa distribuição satisfaz a equação não linear

$$\frac{dp}{dx} + \lambda p^q = 0 , \quad (3.10)$$

definida para o intervalo $a \leq x \leq b$ e sujeita à condição inicial $p(0) = p_o$.

Os resultados subsequentes independem da forma entrópica empregada, (3.6) ou (3.7). Na passagem de (3.6) para (3.7) é necessário supor que $q = 1$ em (3.2).

A equação (3.10) é a generalização da eq. (3.5) baseada na entropia de Tsallis e nos vínculos (3.2) e (3.8). Deve-se ressaltar que a natureza não extensiva desta entropia está intrinsicamente relacionada ao fato da eq. (3.10) ser não linear. Por outro lado, se empregarmos a notação $\lambda_{ef} = \lambda p^{q-1}$, podemos escrever

$$\frac{dp}{dx} + \lambda_{ef} p = 0 . \quad (3.11)$$

Isto por sua vez indica que a eq. (3.11) pode ser empregada para descrever um decaimento (crescimento) com algum tipo de memória, onde q , de alguma forma, estaria conectado com uma memória do sistema.

3.3 Aplicações

Vamos considerar, primeiramente, a equação que descreve o movimento médio de uma partícula em meio fluido viscoso sem atuação de forças externas [35]. Neste caso, a equação de movimento pode ser escrita como

$$m \frac{dv}{dt} = -bv^q , \quad (3.12)$$

com m representando a massa da partícula, v sua velocidade e b o coeficiente de atrito em relação meio. Por sua vez, o parâmetro q está relacionado à turbulência provocada no meio (comportamento não extensivo). A solução desta última equação apresenta então a forma

$$v(t) = v_o \left[1 - (1 - q)v_o^{q-1} \frac{b}{m} t \right]^{1/(1-q)} . \quad (3.13)$$

Quando $q = 1$, temos um escoamento não turbulento e o caráter extensivo é recuperado, isto é,

$$v(t) = v_o \exp \left(-\frac{b}{m} t \right) . \quad (3.14)$$

Um outro exemplo da equação (3.10) pode ser obtido da cinética química [36]. A concentração de uma dada substância, C_A , obedece uma equação empírica para a sua taxa de variação,

$$dC_A/dt = K C_A^\alpha C_B^\beta C_C^\gamma \cdots \quad (3.15)$$

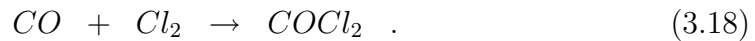
Nessa equação, K representa a constante de reação. A constante α está relacionada com a concentração de A e representa a ordem de reação com respeito a A . Da mesma forma β, γ, \cdots , estão relacionados com as concentrações de B, C, \cdots . A soma $\alpha + \beta + \gamma + \cdots$ representa a ordem total de reação. Pode-se, sob determinadas condições experimentais, considerar as concentrações C_B, C_C, \cdots constantes, de forma que

$$\frac{dC_A}{dt} = -K_A A^\alpha \quad (3.16)$$

Nesse caso, o parâmetro $q = \alpha$ representará a ordem de reação relacionada à substância A e a concentração da substância será dada por

$$C_A = C_{A_0} [1 - (1 - q) C_{A_0}^{q-1} K_A t]^{1/(1-q)} \quad (3.17)$$

Tomemos como exemplo a reação química que descreve a formação da fase gasosa do fogsênio [37]



Esta é uma reação de ordem 5/3, sendo de ordem 3/2 com respeito ao Cl_2 e de primeira ordem em relação ao CO . Então para o Cl_2 temos $q = 3/2$ e conseqüentemente chegamos a

$$\frac{d[Cl_2]}{dt} = -K_{Cl_2} [Cl_2]^{3/2} \quad (3.19)$$

Portanto, a solução desta última equação é

$$[Cl_2] = [Cl_2]_0 \left\{ 1 + \frac{1}{2} [Cl_2]_0^{1/2} K_{Cl_2} t \right\}^{-2} \quad (3.20)$$

ou, alternativamente,

$$\frac{1}{[Cl_2]^{1/2}} - \frac{1}{[Cl_2]_0^{1/2}} = \frac{1}{2} K_{Cl_2} t \quad (3.21)$$

que é a forma usualmente apresentada na literatura.

Capítulo 4

Equações diferenciais não lineares baseadas na entropia de Tsallis

O esquema empregado para generalizar a equação de decaimento (crescimento) exponencial pode ser estendido para o caso de equações diferenciais ordinárias de ordem superior [34]. Para introduzir esta generalização é apresentado inicialmente um procedimento que tem como ponto de partida a equação diferencial de decaimento (crescimento) exponencial e como fecho as equações diferenciais lineares de coeficientes constantes. A seguir, este procedimento é generalizado no contexto da entropia de Tsallis dando origem a uma família de equações diferenciais não lineares de coeficientes constantes. Finalmente, fazemos uma aplicação destas equações para obter uma conexão entre a equação de difusão para meios porosos e a entropia de Tsallis.

4.1 Família de equações não lineares com coeficientes constantes

A equação de decaimento (crescimento) exponencial

$$\frac{dp}{dx} + \lambda p = 0 \quad (4.1)$$

pode ser considerada uma representante de uma família de equações lineares de ordem arbitrária . De fato, se supusermos que

$$p = p_o \exp(-\lambda x) \quad (4.2)$$

é solução de qualquer uma das equações que compõem esta família, verificamos que a equação diferencial de ordem N ($N = 1, 2, 3, \dots$)

$$\sum_{n=0}^N a_n \frac{d^n p}{dx^n} = 0 \quad (4.3)$$

é uma representante típica desta família, onde os coeficientes a_n são constantes. Além disso, a substituição da eq. (4.2) na eq. (4.3) conduz a uma equação característica para λ cuja forma é

$$\sum_{n=0}^N a_n (-\lambda)^n = 0 \quad (4.4)$$

Assim, o processo de obtenção das soluções para a eq. (4.3) é reduzido a um processo puramente algébrico, que consiste em determinar as raízes $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$ da eq.(4.4).

Seguindo a linha de argumentação do capítulo anterior, a generalização do procedimento acima, baseado na entropia de Tsallis, consiste em empregar a relação

$$\frac{dp}{dx} \propto p^q$$

ao invés de

$$\frac{dp}{dx} \propto p .$$

Isso equivale a fazer a substituição de

$$p(x) = p_o \exp(-\lambda x)$$

por

$$p(x) = p_o [1 - (1 - q)p_o^{q-1} \lambda x]^{1/(1-q)} . \quad (4.5)$$

Tendo como base as relações acima, podemos construir uma família de equações diferenciais ordinárias não lineares de coeficientes constantes cujo N -ésimo elemento é

$$\sum_{n=0}^N a_n \frac{d^n}{dx^n} p^{(N-n)(q-1)+1} = 0 . \quad (4.6)$$

Esta equação é justamente a generalização procurada para a eq.(4.3) no contexto da entropia de Tsallis. Sem perda de generalidade, o N -ésimo termo desta equação, $d^N p/dx^N$, foi considerado linear em $p(x)$. Analogamente ao caso da eq. (4.4), a correspondente equação indicial para o N -ésimo elemento da família acima obtida é dada por

$$\begin{aligned} a_N (-\lambda)^N \prod_{j=0}^{N-2} [(j+1)q - j] \\ + \sum_{n=1}^{N-1} a_n (-\lambda)^n \prod_{j=N-n-1}^{N-2} [(j+1)q - j] + a_0 = 0 . \end{aligned} \quad (4.7)$$

Esta última equação é válida para $N \geq 2$ e, quando $N = 1$, ela deve ser substituída por

$$a_1(-\lambda) + a_0 = 0. \quad (4.8)$$

Para $N = 2$ temos, por exemplo,

$$a_2 \frac{d^2 p}{dx^2} + a_1 \frac{dp}{dx} + a_0 p^{2q-1} = 0 \quad (4.9)$$

e a correspondente equação característica é

$$a_2(-\lambda)^2 q + a_1(-\lambda)q + a_0 = 0 \quad (4.10)$$

Como era de se esperar, as equações (4.6) e (4.7) ficam reduzidas às eqs. (4.3) e (4.4) no limite $q \rightarrow 1$, respectivamente.

É interessante ressaltar que a superposição de soluções particulares da eq. (4.6) não é uma solução desta equação, pois o princípio da superposição, que é válido para a eq. (4.3), não mais pode ser empregado para a eq. (4.6). Nas aplicações apresentadas no desenvolvimento deste trabalho serão levadas em conta somente soluções particulares que contemplem as condições de contorno do problema. Como primeiro exemplo, faremos uma aplicação ao estudo da difusão anômala.

4.2 A equação da difusão

Consideremos uma substância imersa em um determinado substrato, por exemplo, um pouco de tinta num grande recipiente com água. Seja m a massa da substância por unidade de volume. Vamos supor que sua distribuição inicial não seja uniforme, isto é, $\rho = \rho(\vec{x})$. Em geral, esta não é uma situação de equilíbrio e haverá um movimento de forma que a concentração inicial da substância seja modificada. Em linhas gerais, esta modificação ocorre no sentido de aumentar a entropia e tendendo a uniformizar a concentração, na ausência de forças externas. Analisemos mais detalhadamente

esse processo num caso unidimensional e sem a presença de forças externas. Devido a não uniformidade na distribuição da massa haverá um fluxo J_x da substância, proporcional ao seu gradiente de concentração, isto é,

$$J_x = -D \frac{\partial \rho}{\partial x} . \quad (4.11)$$

Por outro lado, a massa desta substância é conservada. Localmente, isto é, em termos de equações diferenciais, esta conservação é expressa por uma equação de continuidade,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J_x}{\partial x} = 0 . \quad (4.12)$$

Usando a relação (4.11) em (4.12) obtemos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} , \quad (4.13)$$

que é a equação de difusão na ausência de forças externas, onde D é o coeficiente de difusão.

Na difusão ordinária, descrita pela eq. (4.13), o deslocamento quadrático médio é proporcional ao tempo, isto é, $\langle x^2 \rangle \propto t$. Porém, em várias situações o deslocamento quadrático médio pode apresentar uma variedade de comportamentos alternativos . Dependendo do sistema físico estudado, eles podem variar desde leis de difusão generalizada, $\langle x^2 \rangle \propto t^\alpha$ ($\alpha \neq 1$), até situações nas quais $\langle x^2 \rangle$ não é sequer uma quantidade bem definida. Estes fenômenos caracterizam a difusão anômala [38].

4.3 Aplicação à difusão anômala correlacionada

Uma variedade de situações de difusividade física são descritas genericamente pela equação [39]

$$\frac{\partial \phi^\mu}{\partial t} = \frac{\partial^2 \phi^\nu}{\partial x^2} , \quad (\mu, \nu \in \mathcal{R}) . \quad (4.14)$$

Quando $\mu = 1$ e $\nu \neq 1$ a equação (4.14) representa a equação de difusão em meios porosos (difusão anômala correlacionada)

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial^2 \phi^\nu}{\partial x^2} , \quad (\nu \in \mathcal{R}) . \quad (4.15)$$

Aqui, por simplicidade, ρ foi redefinido de modo que o coeficiente análogo a D na eq. (4.13) tenha valor unitário. Do ponto de vista matemático, o ingrediente básico da equação de difusão correlacionada é $\nu \neq 1$.

Usando a generalização da seção (1.1) para as equações diferenciais lineares podemos obter uma relação entre a entropia de Tsallis e a equação de difusão anômala correlacionada. Esta conexão é baseada na separação de variáveis

$$\phi(x, t) = T(t) X(x) \quad (4.16)$$

a ser empregada na eq. (4.15). Obtemos então

$$\frac{1}{T^\nu} \frac{dT}{dt} = \frac{1}{x} \frac{d^2 X^\nu}{dx^2} = -\sigma , \quad (4.17)$$

onde σ é uma constante de separação de variáveis. Usando $Y = X^\nu$, verificamos que

$$dT/dt = -\sigma T^\nu \quad (4.18)$$

e

$$d^2 Y/dx^2 = -\sigma Y^{1/\nu} . \quad (4.19)$$

Como estas equações são membros da família gerada pela eq. (4.6), a conexão entre a entropia de Tsallis e a equação de difusão anômala correlacionada é então estabelecida.

A equação (4.18) corresponde ao elemento com $N = 1$ na família (4.6), ou seja, recai na expressão

$$a_1 \frac{dT}{dt} + a_0 T^q = 0$$

com $a_1 \lambda - a_0 = 0$. Nesse caso, $q = \sigma$, $\lambda = a_0/a_1 = \sigma$ e a equação (4.18) tem a solução dada por

$$T(t) = T_0 \left[1 - (1 - \nu) T_0^{\nu-1} \sigma t \right]^{1/(1-\nu)}, \quad (4.20)$$

onde T_0 é uma constante.

Se a constante a_1 for nula em (4.9) e (4.10) obtemos

$$X(x) = X_0 \left[1 + \left(\frac{1 - \nu}{2\nu} \right) X_0^{(1-\nu)/2} \lambda x \right]^{2/(\nu-1)} \quad (4.21)$$

como solução para a eq. (4.19), onde X_0 é uma constante e λ é a solução da equação indicial

$$(1 + \nu)\lambda^2 + 2\nu\sigma = 0 .$$

Então as soluções de (4.15), baseadas na separação de variáveis (4.16), são escritas como

$$\begin{aligned} \phi(x, t) &= T_0 \left[1 - (1 - \nu) T_0^{\nu-1} \sigma t \right]^{1/(1-\nu)} \\ &\times X_0 \left[1 + \left(\frac{1 - \nu}{2\nu} \right) X_0^{(1-\nu)/2} \lambda x \right]^{2/(\nu-1)} . \end{aligned} \quad (4.22)$$

Este procedimento é uma extensão natural do método de separação de variáveis aplicado à equação de difusão usual ($\nu = 1$). Entretanto, superposições das

soluções particulares (4.22) não são soluções da eq. (4.15), visto que ela é uma equação diferencial parcial não linear. Além disso, as soluções (4.22) são complexas quando $\sigma > 0$.

O método acima pode facilmente ser aplicado à equação de difusão generalizada (4.14). Para isto basta reescrever ϕ como $\psi^{1/\mu}$ e ν como ν/μ .

Em geral, a conexão entre a equação de difusão em meios porosos e a entropia de Tsallis, baseada no método de separação de variáveis e na família de equações diferenciais não lineares, pode ser estendida para outras equações diferenciais parciais não lineares.

Capítulo 5

Equações diferenciais não lineares com coeficientes não constantes e equação de Thomas-Fermi

Neste capítulo, a família de equações diferenciais ordinárias não lineares de coeficientes constantes obtidas no capítulo anterior são estendidas para o caso de coeficientes não constantes. Além disso, é desenvolvido um procedimento para obter soluções aproximadas, o qual generaliza o método WKB. A seguir, este método é aplicado ao estudo da equação de Thomas-Fermi para um átomo neutro.

5.1 Família de equações não lineares com coeficientes não constantes

Notemos, primeiramente, que a equação

$$\frac{dp}{dx} + \lambda p^q = 0 \quad (5.1)$$

pode ser generalizada ainda mais se permitirmos que λ venha a ser uma função de x . Neste caso, a eq. (5.1) torna-se

$$\frac{dp}{dx} = -\lambda(x) p^q \quad (5.2)$$

e, após uma integração, temos

$$p(x) = \left[(1-q) \left(\int \lambda(x) dx + C \right) \right]^{1/(1-q)} . \quad (5.3)$$

Se a condição inicial $p(0) = p_o$ for aplicada, a solução acima assume a forma

$$p(x) = p_o \left[1 - (1-q) p_o^{q-1} \int_0^x \lambda(z) dz \right]^{1/(1-q)} . \quad (5.4)$$

Seguindo a linha de raciocínio empregada na seção (3.2), a eq. (5.4) pode ser reobtida ao substituirmos o vínculo (3.7) por

$$\beta = \int_a^b f(x) (p(x))^q dx , \quad (5.5)$$

onde $f(x) \propto \lambda(x)$. Um caso particular importante corresponde a $\lambda(x) = 2\lambda_o x$, pois conduz à generalização da distribuição gaussiana, isto é, a eq. (5.4) toma a forma característica

$$p(x) = p_o \left[1 - (1-q) p_o^{q-1} \lambda_o x^2 \right]^{1/(1-q)} . \quad (5.6)$$

Para generalizar o procedimento que conduziu à eq. (5.2), permitiremos que as constantes a_n da equação (4.5) sejam funções de x , ou seja,

$$\sum_{n=0}^N a_n(x) \frac{d^n}{dx^n} p^{(N-n)(q-1)+1} = 0 . \quad (5.7)$$

No contexto da entropia de Tsallis, a generalização expressa pela eq. (5.7) é a forma mais geral de equações não lineares discutidas neste trabalho.

Assim como no caso linear ($q = 1$), não existe solução analítica geral para estas equações. É natural, portanto, efetuarmos análises aproximadas com o objetivo de obter informação sobre as possíveis soluções destas equações. Por outro lado, é sabido que o método de aproximação semi-clássica WKB (Wentzel, Krammer, Brillouin) é um caminho possível para se obter tais soluções no caso usual ($q = 1$). Generalizaremos aqui tal procedimento, ampliando o método para $q \neq 1$.

5.2 Aproximação WKB

Antes de considerarmos a generalização do método WKB, é conveniente revê-lo em sua forma usual [40]. Nesse caso, uma boa solução aproximada da equação

$$\frac{d^2 p}{dx^2} = f(x) p \quad (5.8)$$

pode ser obtida, desde que $f(x)$ satisfaça certas restrições. Basicamente, ela deve ser uma função que varie lentamente com x . Para se obter tal solução, assim como seu critério de aplicabilidade, utilizemos uma função auxiliar $g(x)$ definida por

$$p(x) = \exp(g(x)) \quad (5.9)$$

Substituindo esta relação na equação diferencial (5.8), verificamos que

$$\frac{d^2 g}{dx^2} + \left(\frac{dg}{dx}\right)^2 - f = 0 \quad (5.10)$$

Vamos assumir, como primeira aproximação, que o termo d^2g/dx^2 seja suficientemente pequeno. Temos então

$$\frac{dg}{dx} \approx \pm f^{1/2} \quad (5.11)$$

e, conseqüentemente,

$$g(x) \approx \pm \int f(x)^{1/2} dx \quad , \quad (5.12)$$

que por sua vez implica

$$p(x) \approx \exp\left(\pm \int (f(x))^{1/2} dx\right) \quad . \quad (5.13)$$

O procedimento acima supõe que $|d^2g/dx^2| \ll |f|$. Portanto, a condição de validade desta aproximação é

$$\left|\frac{d^2g}{dx^2}\right| \approx \frac{1}{2} \left|\frac{df/dx}{f^{1/2}}\right| \ll |f| \quad . \quad (5.14)$$

Além disso, pode-se obter facilmente aproximações sucessivas usando-se um procedimento iterativo.

5.3 Generalização do método WKB

A partir do exposto na seção anterior vamos considerar a extensão para $q \neq 1$.

A equação diferencial de segunda ordem oriunda da expressão (5.7) é

$$a_2(x) \frac{d^2}{dx^2} p + a_1(x) \frac{dp^q}{dx} + a_0(x) p^{2q-1} = 0 \quad . \quad (5.15)$$

Para o caso particular $a_1(x) = 0$, ela pode ser reescrita como

$$\frac{d^2 p}{dx^2} = f(x) p^{2q-1} \quad , \quad (5.16)$$

onde $f(x) = -a_o(x)/a_2(x)$. Note que esta equação é reduzida à eq.(5.8) no limite $q \rightarrow 1$.

Visto que os desenvolvimentos da seção anterior estão baseados na função $p(x) = \exp(g(x))$ é natural que na generalização do método WKB seja empregada a relação

$$p(x) = [1 + (1 - q)g(x)]^{1/(1-q)} , \quad (5.17)$$

já que a generalização da função exponencial, no contexto deste trabalho, está calcada na substituição

$$e^x \rightarrow [1 + (1 - q)x]^{1/(1-q)} . \quad (5.18)$$

A utilização desta nova relação na equação (5.16) conduz a

$$[1 + (1 - q)g] \frac{d^2g}{dx^2} + q \left(\frac{dg}{dx} \right)^2 - f = 0 . \quad (5.19)$$

Como primeira aproximação, e em analogia com caso $q = 1$, o termo com d^2g/dx^2 pode ser negligenciado, resultando em

$$\frac{dg}{dx} \approx \pm \left(\frac{f}{q} \right)^{1/2} , \quad (5.20)$$

o que nos leva a

$$g(x) \approx \pm q^{-1/2} \int f(x)^{1/2} dx . \quad (5.21)$$

A expressão aproximada para $p(x)$ apresenta, portanto, a forma

$$p(x) \approx \left[1 \pm (1 - q) q^{-1/2} \int f(x)^{1/2} dx \right]^{1/(1-q)} . \quad (5.22)$$

Analogamente a seção anterior, a condição de validade para esta aproximação é

$$\left| \frac{d^2g}{dx^2} \right| \approx \left| \frac{df/dx}{2q^{1/2}f^{1/2}} \right| \ll \left| \frac{f}{1 + (1 - q)g} \right| . \quad (5.23)$$

Da mesma forma, aproximações sucessivas de (5.19) podem ser obtidas por iteração.

É conveniente, neste ponto, ressaltarmos a diferença essencial entre os casos $q = 1$ e $q \neq 1$. Na primeira situação, a equação diferencial é linear e portanto é possível obtermos uma solução geral aproximada a partir das soluções particulares (5.11). Por sua vez, o segundo caso implica uma equação não linear, inviabilizando o uso de superposição das soluções particulares. Logo, o procedimento desenvolvido neste trabalho é útil em contextos nos quais uma das soluções particulares pode ser considerada uma boa aproximação.

5.4 Aplicação à equação de Thomas-Fermi

Para exemplificar o procedimento anterior vamos considerar a equação de Thomas-Fermi para um átomo livre (veja o apêndice A)

$$\frac{d^2 F}{dx^2} = x^{-1/2} F^{3/2} , \quad (5.24)$$

cujas condições de contorno são $F(0) = 1$ e $F(\infty) = 0$ para o caso de um átomo neutro. Por comparação com a equação (5.16), concluímos que $f(x) = x^{-1/2}$ e $q = 5/4$. Então, a eq. (5.21) conduz a

$$g(x) = \pm \frac{2}{\sqrt{5}} x^{3/4} + C_{\pm} , \quad (5.25)$$

que por sua vez implica

$$F_{\pm} = \left[1 + \left(1 - \frac{5}{4} \right) \left(\pm \frac{2}{\sqrt{5}} x^{3/4} + C_{\pm} \right) \right]^{\frac{1}{1-5/4}} . \quad (5.26)$$

Escolhendo a solução F_- e ajustando a constante C_- às condições de contorno, obtemos

$$F(x) = \left(1 + \frac{2}{3\sqrt{5}} x^{3/4}\right)^{-4}. \quad (5.27)$$

Neste exemplo, temos como condição de validade $x^{3/4} \gg 3\sqrt{5}/28$, indicando que a aproximação é melhor para $x \gg 1$. Por outro lado, a solução satisfaz exatamente a condição inicial $F(0) = 1$, fazendo com que esta solução seja muito boa mesmo para $x \ll 1$. De maneira geral, quando $f(x)$ é uma função suave de x , a solução correspondente torna-se mais acurada. Em particular, quando $f(x)$ é constante, a solução torna-se exata.

A solução da equação (5.24) comporta-se assintoticamente como

$$F(x) \sim 144 x^{-3} \quad (5.28)$$

Com base nessa forma assintótica, Sommerfeld (1932) (veja, por exemplo, [41]) obteve uma solução analítica aproximada dada por

$$F(x) = \left[1 + \left(\frac{x}{a}\right)^d\right]^{-c} \quad (5.29)$$

com $a = 12^{2/3}$, $d = 0,772$ e $c = 3/d = 3,886$.

Para compararmos os resultados obtidos nas diferentes maneiras de resolver a eq. (5.24), estão representadas na Fig. (5.1) a solução obtida neste trabalho, eq. (5.27), a solução de Sommerfeld, eq. (5.29) e a solução numérica [42].

Capítulo 6

Aproximação de integrais: método do ponto de sela generalizado

Estudamos nos capítulos anteriores equações diferenciais baseadas na estatística de Tsallis. Neste capítulo e no próximo, concentraremos a atenção no cálculo aproximado de integrais, também fundamentado na mesma estatística. Este estudo é motivado pela necessidade de recorrer a algum método de aproximação quando o grau de complexidade do sistema em foco dificulta a obtenção de uma solução exata para o problema. As aplicações serão empregadas no sentido de ilustrar a teoria. Sendo assim, é natural considerar exemplos onde é possível uma comparação direta entre os resultados aproximado e exato. Em particular, neste capítulo, será desenvolvida uma generalização do método do ponto de sela, que se mostrará útil na aproximação de integrais de funções que decaem mais lentamente ou mais rapidamente que a familiar gaussiana. Iniciaremos o estudo revendo o método usual.

6.1 Método do ponto de sela

Uma ferramenta útil para cálculo aproximado de integrais é o método do ponto de sela [43], limitado aqui ao eixo real. Neste caso, o método está baseado na seguinte aproximação

$$\begin{aligned} I &= \int_a^b dx \exp(f(x)) \\ &\approx \int_a^b dx \exp \left[f(x_o) + f'(x_o)(x - x_o) + \frac{f''(x_o)}{2}(x - x_o)^2 \right]. \end{aligned} \quad (6.1)$$

Supondo, por simplicidade, que $f(x)$ tenha um único máximo em $x = x_o$, com $x_o \in [a, b]$, teremos (supondo $f''(x_o) \neq 0$)

$$f'(x_o) = \left. \frac{df}{dx} \right|_{x=x_o} = 0 \quad (6.2)$$

e

$$f''(x_o) = \left. \frac{d^2f}{dx^2} \right|_{x=x_o} < 0. \quad (6.3)$$

Suporemos também que é possível estender $a \rightarrow -\infty$ e $b \rightarrow \infty$, com $f(\pm\infty) = 0$. Isto faz com que (6.1) tome a forma de uma integral gaussiana, ou seja,

$$\begin{aligned} I &\approx \exp(f(x_o)) \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left(-\frac{1}{2} |f''(x_o)| (x - x_o)^2 \right) \\ &= \sqrt{\frac{2\pi}{|f''(x_o)|}} \exp(f(x_o)). \end{aligned} \quad (6.4)$$

O cálculo aproximado de I fica então reduzido a encontrar a raiz da eq. (6.2). Além disso, para calcular a integral aproximada de uma função positiva e não nula $g(x)$, quando é possível aplicar o método, basta reescrevê-la como

$$\int_a^b dx g(x) = \int_a^b dx \exp(\ln g(x)) \quad (6.5)$$

e aplicar o procedimento acima com $f(x) = \ln g(x)$.

Uma aplicação simples do método acima é a avaliação do comportamento assintótico da função Gama,

$$\Gamma(n+1) = \int_0^{\infty} dx x^n \exp(-x) , \quad (6.6)$$

que pode ser reescrita como

$$\Gamma(n+1) = \int_0^{\infty} dx \exp(n \ln x - x) . \quad (6.7)$$

Então $f(x) = n \ln x - x$ e a condição (6.2) implica $x_o = n$ e $f''(x_o) = -1/n$. Substituindo estes valores em (6.4) obtemos a conhecida aproximação de Stirling,

$$\Gamma(n+1) \approx n^n \sqrt{2\pi n} \exp(-n) , \quad (6.8)$$

que é extremamente útil para $n \gg 1$.

Existem situações, porém, que o método do ponto de sela leva a uma aproximação grosseira. Um exemplo típico é sua aplicação ao cálculo aproximado da integral da distribuição lorentziana,

$$L = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{1+x^2} . \quad (6.9)$$

Nesse caso, $f(x) = -\ln(1+x^2)$ e a condição (6.2) implica $x_o = 0$ e $f''(x_o) = -2$. Então

$$L \approx \sqrt{\pi} , \quad (6.10)$$

resultado que está em franca discrepância com o valor exato da integral (6.9), $L = \pi$. De uma maneira geral, o método do ponto de sela aplicado a funções como

$$g(x) = \frac{1}{(1+\sigma x^2)^\alpha} \quad \left(\alpha > \frac{1}{2} \right) \quad (6.11)$$

fornece o valor aproximado

$$I \approx \sqrt{\frac{\pi}{\sigma\alpha}} . \quad (6.12)$$

Este resultado, quando comparado com o valor exato,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(1 + \sigma x^2)^\alpha} = \sqrt{\frac{\pi}{\sigma}} \frac{\Gamma(\alpha - 1/2)}{\Gamma(\alpha)} , \quad (6.13)$$

mostra-se péssimo para $\alpha \sim 1$ e torna-se melhor a medida que α aumenta, tendendo ao valor exato quando $\alpha \rightarrow \infty$.

O exemplo acima ilustra uma questão muito interessante: o método do ponto de sela conduz a boas avaliações basicamente quando o integrando de (6.1) puder, com boa aproximação, ser representado por uma distribuição gaussiana. Isto, definitivamente, não ocorre com $g(x)$, expressa em (6.11), para $\alpha \rightarrow 1/2$. Em outras palavras, as caudas de uma gaussiana e de $g(x)$ são notoriamente distintas para $\alpha \sim 1$, de forma que uma gaussiana não representa bem $g(x)$.

Estes últimos exemplos indicam que é desejável encontrar outra forma de aproximação para as integrais de funções do tipo (6.11). Este é justamente o objetivo da próxima seção.

6.2 Método do ponto de sela generalizado

Antes de estender o método do ponto de sela, vamos considerar a generalização das funções exponencial e logarítmica,

$$e_q^x = \exp_q(x) \equiv [1 + (1 - q)x]^{1/(1-q)} \quad (6.14)$$

e

$$\ln_q x \equiv \frac{x^{1-q} - 1}{1 - q} , \quad (6.15)$$

que são naturais no contexto da estatística de Tsallis. Esta notação possibilita-nos, por exemplo, escrever a q -energia interna e a q -energia livre como $U_q = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln_q Z_q$ e $F_q = -(1/\beta) \ln_q Z_q$, respectivamente. A distribuição q -gaussiana, apresentada na eq. (5.6), pode ser escrita como $G_q(x; \lambda) = \exp_q(-\lambda x^2)$. Na figura (6.1) é apresentada a distribuição q -gaussiana para valores típicos de q . Em particular, da definição de $G_q(x; \lambda)$ vemos que a função $g(x)$, apresentada em (6.11), pode ser reescrita como $g(x) = G_q(x; -\sigma/(1-q))$, com $q = 1 + 1/\alpha$. Assim, uma generalização do método do ponto de sela em que $\exp(f(x))$ seja substituída por $\exp_q(f(x))$ contorna as limitações discutidas no final da seção anterior.

Consideraremos, portanto, a seguinte generalização para a aproximação (6.1):

$$\begin{aligned} I_q &= \int_a^b dx e_q^{f(x)} \\ &\approx \int_a^b dx \exp_q \left[f(x_o) + f'(x_o)(x - x_o) + \frac{f''(x_o)}{2}(x - x_o)^2 \right] . \end{aligned} \quad (6.16)$$

Como no caso usual, se x_o é um ponto de máximo, assumiremos as condições (6.2) e (6.3) e teremos então (substituindo a por $-\infty$ e b por ∞ , ou seja, deformando o contorno para incluir todo o eixo real)

$$\begin{aligned} I_q &\approx \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp_q \left(f(x_o) - \frac{|f''(x_o)|}{2}(x - x_o)^2 \right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left\{ 1 + (1 - q) \left[f(x_o) - \frac{|f''(x_o)|}{2}(x - x_o)^2 \right] \right\}^{1/(1-q)} \\ &= \exp_q(f(x_o)) \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp_q \left(-\frac{|f''(x_o)|(x - x_o)^2}{2[1 + (1 - q)f(x_o)]} \right) . \end{aligned} \quad (6.17)$$

Assim , usando (6.13) com $\sigma = [(q - 1) |f''(x_o)|] / \{2[1 + (1 - q)f(x_o)]\}$ e $\alpha = 1/(q - 1)$, verificamos que

$$I_q \approx \exp_q(f(x_o)) \left(\frac{2\pi[1 + (1 - q)f(x_o)]}{(q - 1) |f''(x_o)|} \right)^{1/2} \frac{\Gamma\left(\frac{3-q}{2(q-1)}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} . \quad (6.18)$$

Se quisermos calcular aproximadamente a integral de uma função $h(x)$, estritamente positiva, é possível utilizar a identidade

$$\int_a^b h(x)dx = \int_a^b dx \exp_q(\ln_q h(x)) , \quad (6.19)$$

implicando $f(x) = \ln_q h(x)$. Isto, por sua vez, conduz a $[1 + (1 - q)f(x_o)] = (h(x_o))^{1-q}$ e $\exp_q f(x_o) = h(x_o)$.

É importante frisar também que, até o presente momento, usamos $q > 1$, sendo que o mesmo deverá ser escolhido apropriadamente para cada caso.

Um caminho natural é eleger q ditado pela lei de potência apresentada por $h(x)$ para grandes valores de x .

Para o caso $q < 1$ a q -gaussiana tem cauda finita (veja figura (6.1)). Isto possibilita usarmos

$$\int_{-1/\sqrt{\sigma}}^{1/\sqrt{\sigma}} dx (1 - \sigma x^2)^\alpha = \sqrt{\frac{\pi}{\sigma}} \frac{\Gamma(1 + \alpha)}{\Gamma(3/2 + \alpha)} \quad (6.20)$$

com $\alpha = 1/(1-q)$ e $\sigma = ((1-q) |f''(x_o)|) / (2[1 + (1-q)f(x_o)])$ no cálculo de (6.17). Dessa forma, quando $q < 1$ a eq. (6.18) é substituída por

$$I_q \approx \exp_q(f(x_o)) \left(\frac{2\pi[1 + (1-q)f(x_o)]}{(1-q) |f''(x_o)|} \right)^{1/2} \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{5-3q}{2(1-q)}\right)} . \quad (6.21)$$

6.2.1 Aplicações

Apesar de trivial, é instrutivo reestudar, como exemplo, a integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(1 + \sigma x^2)^\alpha} \quad \left(\alpha > \frac{1}{2} \right) , \quad (6.22)$$

mas empregando agora a expressão (6.18). O objetivo aqui é ressaltar o procedimento para se obter o valor de q . Para tal, a comparação das formas assintóticas de

$$\frac{1}{(1 + \sigma x^2)^\alpha} \approx \sigma^{-\alpha} x^{-2\alpha} \quad (6.23)$$

com

$$\exp_q(-\lambda x^2) \approx [-(1-q)\lambda]^{1/(1-q)} x^{2/(1-q)} , \quad (6.24)$$

permite-nos concluir que

$$q = \frac{1}{\alpha} + 1 . \quad (6.25)$$

Além disso, as eqs. (6.2) e (6.3) implicam $x_o = 0$ e $f''(x_o) = -2\alpha\sigma$. Substituindo estes valores na equação (6.18) reobtemos (6.13), que é obviamente um avanço substancial se comparado com resultado obtido pelo método do ponto de sela usual (veja eq. (6.12)). Em particular, esta observação é evidente para a distribuição lorentziana, visto que $\alpha = \sigma = 1$ em (6.22), implicando $q = 2$ e $I_2 = \pi$, seu valor exato.

Consideremos, agora, um outro exemplo de aplicação do método do ponto de sela generalizado, porém para $q < 1$. Neste caso, vamos calcular

$$I = \int_{-1}^1 dx \cos\left(\frac{\pi x}{2}\right) . \quad (6.26)$$

Apesar de ser possível calcular exatamente esta integral, este exemplo ilustra uma outra maneira de se obter o valor de q , que é uma questão essencial no nosso processo de aproximação. Devemos então encontrar o valor de q que torna

$$\cos\left(\frac{\pi x}{2}\right) \approx a \exp_q(-\lambda x^2) \quad (6.27)$$

a aproximação mais acurada possível (já usando o fato de que $x_o = 0$). Para tal, suporemos primeiramente que $\cos(\pi x/2)$ e $a \exp_q(-\lambda x^2)$ coincidam em $x = \pm 1$ (ajuste das caudas). Esta condição implica

$$\lambda = \frac{1}{1-q} . \quad (6.28)$$

Entretanto isto não é suficiente para determinar o valor de q . Em vista disso, imporemos que as expansões, até segunda ordem, também coincidam para ambas as funções, isto é,

$$1 - \frac{\pi^2}{8}x^2 = a(1 - \lambda x^2) . \quad (6.29)$$

Com isso, obtemos $a = 1$ e

$$q = 1 - \frac{8}{\pi^2} = 0,18943\dots \quad (6.30)$$

Com a substituição deste valor de q em (6.21), usando $f(x_o) = 0$ e $|f''(x_o)| = (\pi/2)^2 = 2\lambda$, verificamos que

$$I \approx \frac{\sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{5-3q}{2(1-q)}\right)} = 1,25363\dots \quad (6.31)$$

Este valor, quando comparado com o resultado exato $I = 4/\pi = 1,27324\dots$, mostra o quanto é boa a aproximação. Por outro lado, se fosse aplicado o caso usual ($q = 1$), isto é, a eq. (6.4), obteríamos $I = \sqrt{8/\pi} = 1,59576\dots$, resultado visivelmente mais grosseiro que (6.31).

Os desenvolvimentos apresentados neste capítulo estão restritos ao caso unidimensional, entretanto os resultados (6.18) e (6.21) podem ser estendidos para várias dimensões. Esta questão não será discutida aqui, apesar de interessante, mesmo porque ela não acrescenta nada de novo na fundamentação do método de cálculo apresentado neste trabalho. Porém, podemos inferir que, de forma geral, o método generalizado pode se tornar extremamente útil para calcular certos tipos de integrais. Integrais com integrandos que podem apresentar desde caudas curtas ($q < 1$) até muito longas ($q > 1$), passando pela gaussiana ($q = 1$).

Capítulo 7

Aproximação de integrais: método variacional

Neste capítulo, trilharemos outro caminho para obter o cálculo aproximado de certos tipos de integrais. Seu desenvolvimento é baseado na desigualdade de Bogoliubov, a qual permite utilizar um procedimento variacional. Esta desigualdade é usualmente empregada no contexto da mecânica estatística, e este fato motiva a notação utilizada neste capítulo. Inicialmente, será apresentado o método na sua feição usual ($q = 1$) e, a seguir, o discutiremos no contexto da entropia de Tsallis ($q \neq 1$). Também será apresentado, de forma breve, um procedimento perturbativo para cálculo de integrais.

7.1 Desigualdade de Bogoliubov

Vamos assumir que a hamiltoniana do sistema seja dada por

$$H = H_0 + H_I \text{ ,} \tag{7.1}$$

onde H_0 é a hamiltoniana do sistema “simplificado”, cujo tratamento é, por hipótese, conhecido, e H_I representa a parcela de correção da hamiltoniana do sistema perturbado. Para facilitar a obtenção da desigualdade de Bogoliubov, é conveniente empregarmos a hamiltoniana auxiliar [44]

$$H_\lambda = H_0 + \lambda H_I . \quad (7.2)$$

O parâmetro λ , pertencente ao intervalo $[0, 1]$, é empregado de forma a interpolar continuamente H_0 e H .

A seguir, consideremos a expansão de MacLaurin para a energia livre, com resto na forma diferencial,

$$F(\lambda) = F(0) + \lambda \left. \frac{dF}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} + \frac{\lambda^2}{2!} \left. \frac{d^2F}{d\lambda^2} \right|_{\lambda=\lambda_o} , \quad (7.3)$$

onde $\lambda_o \in [0, 1]$.

O primeiro termo da expansão acima corresponde à energia livre do sistema não perturbado, isto é,

$$F(0) = F^{(0)} = -\frac{1}{\beta} \ln Z^{(0)} , \quad (7.4)$$

onde

$$Z^{(0)} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-\beta H_o(x)) . \quad (7.5)$$

Nestas, e em outras expressões subsequentes, o índice (0) é empregado para denotar que as grandezas estão sendo calculadas com $\lambda = 0$.

Para a correção seguinte, temos

$$\frac{dF}{d\lambda} = -\frac{1}{\beta Z} \frac{dZ}{d\lambda} = \frac{1}{Z} \int_{-\infty}^{\infty} dx H_I \exp(-\beta H_\lambda) = \langle H_I \rangle . \quad (7.6)$$

Tomando $\lambda = 0$ nesta expressão, temos para o segundo termo de (7.3)

$$\left. \frac{dF}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} = \langle H_I \rangle^{(0)} . \quad (7.7)$$

Uma simples derivação de (7.6) nos fornece o último termo da expansão.

De fato,

$$\begin{aligned} \left. \frac{d^2 F}{d\lambda^2} \right|_{\lambda=\lambda_0} &= \left. \frac{d}{d\lambda} \langle H_I \rangle \right|_{\lambda=\lambda_0} \\ &= -\beta \left[\frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx H_I^2 \exp(-\beta H_\lambda)}{Z} - \left(\frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx H_I \exp(-\beta H_\lambda)}{Z} \right)^2 \right]_{\lambda=\lambda_0} \end{aligned} \quad (7.8)$$

e, finalmente,

$$\left. \frac{d^2 F}{d\lambda^2} \right|_{\lambda=\lambda_0} = -\beta \langle (H_I - \langle H_I \rangle)^2 \rangle \Big|_{\lambda=\lambda_0} . \quad (7.9)$$

Usando $\beta \geq 0$ e o fato de que o segundo momento é sempre positivo, independentemente do valor que λ_0 possa assumir, o resultado acima implica

$$\left. \frac{d^2 F}{d\lambda^2} \right|_{\lambda=\lambda_0} \leq 0 . \quad (7.10)$$

Assim, a expansão (7.3), com as eqs. (7.7) e (7.4) e a desigualdade (7.10), conduzem a $F(\lambda) \leq F^{(0)} + \lambda \langle H_I \rangle^{(0)}$. Finalmente, com a escolha $\lambda = 1$, obtemos a desigualdade de Bogoliubov,

$$F \leq F^{(0)} + \langle H_I \rangle^{(0)} . \quad (7.11)$$

Deixando de lado as questões diretamente relacionadas à mecânica estatística e visando calcular integrais aproximadamente, vamos reescrever esta desigualdade diretamente em termos de Z . Explicitamente,

$$-\frac{1}{\beta} \ln Z \leq -\frac{1}{\beta} \ln Z^{(0)} + \langle H_I \rangle^{(0)} , \quad (7.12)$$

ou seja,

$$Z \geq Z^{(0)} \exp(-\beta \langle H_I \rangle^{(0)}) . \quad (7.13)$$

Nos cálculos acima, por simplicidade de notação, analisamos o caso unidimensional. Mas pode-se constatar facilmente que as conclusões precedentes não dependem da dimensão.

7.1.1 Aplicação

Para exemplificar como a desigualdade (7.13) pode ser usada para calcular integrais de forma aproximada, vamos considerar a integral

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-x^4) , \quad (7.14)$$

cujo integrando desvia sensivelmente de uma distribuição gaussiana. Neste caso, vamos usar as hamiltonianas fictícias $H = x^4$ e $H_o = \alpha x^2$, com $\beta = 1$. Aqui, α é o parâmetro a ser otimizado. Assim,

$$Z \geq \exp \left[- \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx (x^4 - \alpha x^2) \exp(-\alpha x^2)}{\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-\alpha x^2)} \right] \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-\alpha x^2) \quad (7.15)$$

Com a utilização de

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \{1, x^2, x^4\} \exp(-\alpha x^2) = \left\{ \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^{1/2}}, \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha^{3/2}}, \frac{3\sqrt{\pi}}{4\alpha^{5/2}} \right\} , \quad (7.16)$$

obtemos

$$Z \geq I(\alpha) , \quad (7.17)$$

onde

$$I(\alpha) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp \left[\frac{1}{2} \left(1 - \frac{3}{2\alpha^2} \right) \right] . \quad (7.18)$$

Dando seqüência ao procedimento variacional, vamos encontrar α_o tal que $I(\alpha_o)$ seja máxima, isto é,

$$\left. \frac{d}{d\alpha} I(\alpha) \right|_{\alpha=\alpha_o} = 0 .$$

Obtemos então $\alpha_o = \sqrt{3}$ e

$$I(\alpha_o) = \left(\frac{\pi}{3^{1/2}} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{1}{4} \right) = 1,0488... \quad (7.19)$$

Por outro lado, nesse exemplo, podemos avaliar exatamente Z ,

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-x^4) = \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{1}{4}\right) = 1,8128... \quad (7.20)$$

A discrepância entre os resultados ocorre devido às diferenças marcantes entre o integrando exato, $\exp(-x^4)$, e o gaussiano, $\exp(-\alpha x^2)$, empregado como base de cálculo.

7.2 Desigualdade de Bogoliubov generalizada

O procedimento, nesse caso, segue a mesma estrutura da seção anterior. Essencialmente, a diferença consiste em substituir a eq. (7.3) por [45]

$$F_q(\lambda) = F_q(0) + \lambda \left. \frac{dF_q}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} + \frac{\lambda^2}{2!} \left. \frac{d^2 F_q}{d\lambda^2} \right|_{\lambda=\lambda_0} . \quad (7.21)$$

Assim, o primeiro termo é a energia livre generalizada do sistema não perturbado,

$$F_q(0) = F_q^{(0)} = -\frac{1}{\beta} \ln_q Z_q^{(0)} , \quad (7.22)$$

onde

$$Z_q^{(0)} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp_q(-\beta H_o(x)) . \quad (7.23)$$

Para a correção de primeira ordem temos, em analogia com o caso usual ($q = 1$),

$$\left. \frac{dF_q}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} = \left. \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx H_I \exp_q(-\beta H_\lambda)^q}{Z_q^q} \right|_{\lambda=0} = \langle H_I \rangle_q^{(0)} . \quad (7.24)$$

O termo seguinte da expansão (7.21) é calculado de forma similar,

$$\left. \frac{d^2 F_q}{d\lambda^2} \right|_{\lambda=\lambda_o} = - q\beta Z_q^{q-1} \left[\frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx H_I^2 \exp_q(-\beta H_\lambda)^{2q-1}}{Z_q^{2q-1}} - \frac{\left(\int_{-\infty}^{\infty} dx H_I \exp_q(-\beta H_\lambda)^q \right)^2}{(Z_q^q)^2} \right] \Big|_{\lambda=\lambda_o}, \quad (7.25)$$

e temos então

$$\left. \frac{d^2 F_q}{d\lambda^2} \right|_{\lambda=\lambda_o} = -q\beta Z_q^{q-1} \left[\overline{\langle H_I^2 \rangle}_{2q-1} - \langle H_I \rangle_q^2 \right] \Big|_{\lambda=\lambda_o} \quad (7.26)$$

Nesta última expressão, $\overline{\langle H_I^2 \rangle}_{2q-1} = \int_{-\infty}^{\infty} dx H_I^2 p(x)^{2q-1}$. Além disso para manter $\exp_q(-\beta H_\lambda)^{2q-1}$ finita, ou seja, a eq. (7.25), devemos ter $q > 0$. Reescrevendo (7.26) é possível verificar que

$$\left. \frac{d^2 F_q}{d\lambda^2} \right|_{\lambda=\lambda_o} = -q\beta Z_q^{q-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx p(x) \left[p(x)^{q-1} H_I - \langle H_I \rangle_q \right]^2 \Big|_{\lambda=\lambda_o} \leq 0. \quad (7.27)$$

E, portanto, de forma análoga à seção anterior, concluímos que

$$F_q \leq F_q^{(0)} + \langle H_I \rangle_q^{(0)}, \quad (7.28)$$

ou seja, a desigualdade de Bogoliubov preserva sua estrutura funcional na mecânica estatística generalizada baseada na entropia de Tsallis. Reescrita em termos de Z_q , temos

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\beta} \ln_q Z_q &\leq -\frac{1}{\beta} \ln_q Z_q^{(0)} + \langle H_I \rangle_q^{(0)} \\ Z_q &\geq \exp_q(\ln_q Z_q^{(0)} - \beta \langle H_I \rangle_q^{(0)}) \end{aligned} \quad (7.29)$$

ou

$$Z_q \geq \left[1 + (1-q) \left(\ln_q Z_q^{(0)} - \beta \langle H_I \rangle_q^{(0)} \right) \right]^{1/(1-q)}. \quad (7.30)$$

7.2.1 Aplicação

Passemos, agora, ao cálculo aproximado de

$$Z_{4/3} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(1+x^4)^3} . \quad (7.31)$$

Visto que o integrando nesta última equação pode ser escrito como $[1 - (1 - q)3x^4]^{1/(1-q)}$, com $q = 4/3$, constatamos que este valor para q é uma escolha natural, justificando a notação na eq. (7.31). Além disso, $H = 3x^4$ e $\beta = 1$. A exemplo da aplicação precedente, vamos empregar $H_o = \alpha x^2$, implicando $H_I = 3x^4 - \alpha x^2$.

Para que a eq. (7.30) possa ser empregada, é necessário calcular $Z_{4/3}^{(0)}$ e $\langle H_I \rangle_{4/3}^{(0)}$. Temos então

$$Z_{4/3}^{(0)} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp_{4/3}(-\alpha x^2) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(1 + \alpha x^2/3)^3} = \frac{3\sqrt{3}\pi}{8\sqrt{\alpha}} \quad (7.32)$$

e

$$\langle H_I \rangle_{4/3}^{(0)} = \frac{1}{(Z_{4/3}^{(0)})^{4/3}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{(3x^4 - \alpha x^2)}{(1 + \alpha x^2/3)^4} = \frac{9 - \alpha^2}{3^{1/2}\pi^{1/3}\alpha^{11/6}} . \quad (7.33)$$

Então

$$Z_{4/3} \geq I_{4/3}(\alpha) \quad (7.34)$$

com

$$I_{4/3}(\alpha) = \frac{81\sqrt{3}\pi\alpha^{11/2}}{(9 + 5\alpha^2)^3} . \quad (7.35)$$

Queremos agora saber o valor de α que maximiza $I_{4/3}(\alpha)$. O valor obtido é $\alpha_o = \sqrt{99/5}$ e portanto

$$Z_{4/3} \approx I_{4/3}(\alpha_o) = 1,2875... . \quad (7.36)$$

Este valor é bom quando comparado com o valor exato

$$Z_{4/3} = \frac{21\pi}{32\sqrt{2}} = 1,4578\dots \quad (7.37)$$

Estes resultados indicam que aproximações baseadas em integrais q -gaussianas, com H_o quadrático, são uma receita útil para o cálculo de integrais que contenham hamiltonianas quárticas.

7.3 Método perturbativo

Antes da conclusão deste capítulo, discutiremos brevemente uma forma de calcular integrais através de um método perturbativo [45].

Neste caso, supomos que a hamiltoniana também possa ser decomposta em duas partes, isto é,

$$H_\lambda = H_o + \lambda H_I \quad , \quad (7.38)$$

onde λ , diferentemente da análise variacional, é um parâmetro que regula a intensidade da perturbação H_I . Da mesma forma, H_o continua representando a hamiltoniana do sistema não perturbado. A seguir, expandimos a função de partição em série de potências em λ :

$$Z_q(\lambda) = Z_q(0) + \lambda \left. \frac{dZ_q}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} + \frac{\lambda^2}{2!} \left. \frac{d^2 Z_q}{d\lambda^2} \right|_{\lambda=0} + \dots \quad (7.39)$$

O cálculo da integral desejada, $Z_q(\lambda)$, é reduzido então ao cômputo da série (7.39), caracterizando o método perturbativo. Devemos, portanto, calcular

$$\left. \frac{d^n Z_q}{d\lambda^n} \right|_{\lambda=0} \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad , \quad (7.40)$$

tomando como base de cálculo H_o . E este cálculo, por sua vez, é idêntico ao desenvolvido para a energia livre e suas derivadas, realizado na seção precedente. Desejando-se calcular aproximadamente a integral de uma fun ao $h(x)$, estritamente positiva, basta fazer a substituição

$$\int_a^b h(x)dx \approx \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp_q(\ln_q h(x)) \quad (7.41)$$

onde $H = \ln_q h(x) = H_o + (\ln_q h(x) - H_o) = H_o + H_I$.

Capítulo 8

Conclusão

Como foi ressaltado neste trabalho, uma nova forma para a entropia pode conduzir a várias generalizações. Nesse sentido, com base na entropia de Tsallis, exploramos generalizações relacionadas às equações diferenciais ordinárias e ao cálculo aproximado de integrais.

No caso de certas equações diferenciais ordinárias lineares, a não extensividade intrínseca à estrutura que decorre da entropia de Tsallis conduz à não linearidade destas equações no procedimento de generalização. Este fato desvela um novo conjunto de aplicações e resultados. Explicitamente, no capítulo 3, verificamos que a generalização do crescimento (decaimento) exponencial leva a uma equação não linear que pode descrever certos sistemas com comportamento não extensivo. Como exemplos de sistemas regidos por tal equação, são apresentados o movimento de uma partícula em um meio fluido viscoso e a taxa de variação da concentração de uma substância em uma reação química. Suas soluções são, obviamente, vinculadas ao índice entrópico q , o qual assume significado próprio em cada contexto.

A equação de crescimento (decaimento) generalizada permite obter tam-

bém, como mostramos no capítulo 4, uma família de equações diferenciais não lineares de coeficientes constantes de ordem arbitrária. Aplicando o método de separação de variáveis para a equação de difusão anômala correlacionada, chegamos à equações não lineares que são elementos de tal família. A solução, por sua vez, leva a uma conexão entre a difusão anômala e a entropia generalizada de Tsallis. No capítulo 5, a referida família foi generalizada para coeficientes não constantes. Como aplicação, mostramos que a equação de Thomas-Fermi para um átomo é uma representante típica desta nova família. Além disso, é desenvolvido um procedimento que generaliza o método de aproximação WKB, o qual é aplicado a esta equação no caso de um átomo neutro. A solução aproximada da equação de Thomas-Fermi, obtida por este caminho, está em bom acordo com outras apresentadas na literatura, em particular a exata (solução numérica). Este resultado reforça a validade de tal procedimento e nos leva a crer que possa ser aplicado, com sucesso, em outras situações.

Da mesma forma que a generalização da função exponencial, advinda da estatística generalizada de Tsallis, possibilita a construção de equações diferenciais não lineares, ela também se apresenta como elemento que viabiliza a generalização de métodos consagrados para cálculo aproximado de integrais. No capítulo 6, por exemplo, a generalização do método do ponto de sela, apresentado na sua versão real, permite obter boa aproximação para integrais em relação às quais o método usual é insatisfatório ou impraticável. O leque de valores que o índice q pode assumir amplia as possibilidades para a forma das distribuições, as quais passam a apresentar características bastante diferentes da distribuição gaussiana, ampliando portanto o universo de aplicações. No capítulo 7, mostramos como certas integrais podem ser calculadas, aproximadamente, empregando um método que tem como ponto de

partida uma desigualdade de Bogoliubov generalizada e que segue um procedimento variacional. Apresentamos também um procedimento perturbativo, igualmente inspirado no mesmo contexto.

Enfim, acreditamos que os resultados obtidos neste trabalho possam ser úteis, pelo menos em certas situações onde aspectos não extensivos estejam envolvidos. Do ponto de vista matemático, os desenvolvimentos aqui discutidos devem ocupar um papel relevante nos contextos onde, de alguma forma, os desvios do comportamento exponencial (gaussiano, etc.) tendem para a exponencial (gaussiana, etc.) generalizada empregada neste trabalho.

Apêndice A

O modelo de Thomas-Fermi

O método estatístico de Thomas-Fermi é baseado numa aproximação quase-clássica [46, 47]. Essa aproximação é adequada para átomos com um grande número de elétrons, a maior parte deles possuindo números quânticos relativamente grandes. O objetivo do método é obter uma energia potencial efetiva experimentada por uma carga infinitesimal e encontrar, aproximadamente, a densidade eletrônica em torno do núcleo atômico. Vamos considerar um conjunto de elétrons confinados numa região e cujo movimento é sujeito a um potencial efetivo esféricamente simétrico $V(r)$. Supõe-se que este potencial varie suavemente com a posição \vec{r} , de tal forma que o sistema possa ser tratado pela estatística de Fermi-Dirac para partículas livres. Ou seja, a distância que $V(r)$ se mantém praticamente constante é muito grande comparada com o comprimento de onda de De Broglie dos elétrons.

Com estas considerações a descrição do movimento corresponde ao de um conjunto de partículas idênticas, independentes e confinadas em uma caixa cúbica de raio a . Neste caso o auto-valor para a energia de uma única

partícula de massa m é

$$E = \frac{\pi\hbar^2}{2ma^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (\text{A.1})$$

ou, com a notação $r^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$,

$$E = \frac{\pi\hbar^2}{2ma^2}r^2 . \quad (\text{A.2})$$

Vamos definir $N(r)dr$ como o número de estados delimitado pelas superfícies esféricas de raios r e $r+dr$. Estamos supondo, neste caso, que r é um número grande, de tal forma que em $dr \ll r$ estejam contidos muitos estados. Além, disso devemos nos concentrar apenas em um octante, pois n_x , n_y e n_z assumem apenas valores positivos. Dito de outra forma,

$$N(r)dr = \frac{1}{8}4\pi r^2 dr = \frac{\pi}{2}r^2 dr . \quad (\text{A.3})$$

De (A.2) temos

$$r = \frac{(2m)^2 a E^{1/2}}{\pi\hbar} \quad (\text{A.4})$$

e

$$dE = \frac{\pi\hbar^2}{2ma^2}2r dr . \quad (\text{A.5})$$

Substituindo (A.4) e (A.5) em (A.3) verificamos que

$$\mathcal{N}(E)dE = \frac{a^3 m^{3/2} E^{3/2}}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3} dE , \quad (\text{A.6})$$

pois o número de estados entre as energias E e $E+dE$, $\mathcal{N}(E)dE$, e $N(r)dr$ dizem sobre os mesmos estados, isto é, $N(r)dr = \mathcal{N}(E)dE$. Para um sistema de N férmions, a energia total mínima é obtida quando existem duas partículas em cada um dos estados de energia entre $E = 0$ e $E = \mathcal{E}$ (a energia de

Fermi). O fator 2 se deve à presença de duas partículas em cada estado quântico espacial, levando-se em conta o princípio de exclusão de Pauli e as duas possibilidades de spin para cada elétron. O número de partículas do sistema é, então,

$$N = \int_0^{\mathcal{E}} 2\mathcal{N}(E)dE = \frac{a^3(2m)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}[\mathcal{E}]^{3/2} . \quad (\text{A.7})$$

Podemos relacionar o potencial $V(r)$ à densidade eletrônica $\rho(r)$. Para isso, vamos supor que a profundidade do potencial seja tal que os níveis de energia estejam preenchidos até o topo, isto é,

$$\mathcal{E} = -V(r) . \quad (\text{A.8})$$

Essa condição garante que a energia total do átomo seja mínima. Além disso, na fronteira do átomo neutro devemos ter $V(r) = 0$, pois fora de uma distribuição de cargas de simetria central, com carga total nula, o campo também é nulo. Com essas considerações, a densidade eletrônica é expressa como

$$\rho = \frac{N}{a^3} = \frac{(2m)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}[-V(r)]^{3/2} . \quad (\text{A.9})$$

A próxima etapa na sequência do modelo de Thomas-Fermi consiste em empregar a equação de Poisson $\nabla^2\phi = -4\pi e^2\rho_e$ com $\phi = -V/e$ e $\rho_e = -e\rho$. Com a substituição da densidade eletrônica da Eq. (A.9) temos

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}[rV(r)] = -\frac{4e^2(2m)^{3/2}}{3\pi\hbar^3}[-V(r)]^{3/2} , \quad (\text{A.10})$$

visto que ρ não depende das variáveis angulares. Assim, a distribuição do campo no estado fundamental do átomo é dada por uma solução com simetria central que satisfaça as seguintes condições de contorno: para $r \rightarrow 0$ o campo

deve reduzir-se ao campo coulombiano do núcleo, isto é, $rV(r) \rightarrow Z$. Para $r \rightarrow \infty$ devemos ter $Vr \rightarrow 0$, pois a carga total do átomo é nula. Vamos introduzir a variável adimensional x relacionada com r por $r = bx$, onde $b = 0,885a_o/Z^{1/3}$ e $a_o = \hbar^2/me^2$. Fazendo a substituição $-V(r) = (Ze^2F(x))/r$, a equação diferencial toma a forma

$$\frac{d^2F}{dx^2} = x^{-1/2}F^{3/2} \quad (\text{A.11})$$

e as condições de contorno implicam em $F(0) = 1$ e $F(\infty) = 0$. A Eq. (A.11) é a conhecida equação de Thomas-Fermi para um átomo, sendo que a condição $F(\infty) = 0$ é usada no caso de um átomo neutro.

Bibliografia

- [1] C. Caratheódory, *Math. Ann.* **67**, 355 (1909).
- [2] L. Tisza, *Generalized Thermodynamics* (The MIT Press, 1966).
- [3] H. B. Callen *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, (John Wiley&Sons, New York, 1985), cap. 1.
- [4] P. T. Landsberg, *Thermodynamics and Statistical Mechanics*, (Dover Publications, New York, 1990), p. 102.
- [5] P. T. Landsberg, *Equilibrium Always a Entropy Maximum ?*, *J. Stat. Phys.* **35**, 159 (1984); D. Pavon, *Gen. Rel. Grav.* **19**, 375 (1987).
- [6] A. M. Salzberg, *Exact Statistical Thermodynamic of Gravitational Interactions in One and Two Dimensions*, *J. Math. Phys.* **6**, 158 (1965); W.C.Saslaw, *Gravitational Physics of Stellar and Galactic Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 1985) p. 217; J. Binney and S. Tremaine, *Galactic Dynamics*, (Princeton University Press, Princeton, 1987) p. 267; H. E. Kandrup, *Phys. Rev. A* **40**, 7265 (1989); H. S. Robertson, *Statistical Thermophysics*, (P. T. R. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1993) p. 96.
- [7] B. J. Hiley and G. S. Joyce, *Proc. Soc.* **85**, 493 (1965).

- [8] M. F. Shlesinger and B. D. Hughes, Phys. A **109**, 697 (1981); E. W. Montrol and M. F. Shlesinger, J. Stat Phys. **32**, 209 (1983).
- [9] J. O. Indekeu, *Line Tension near the wetting Transition: Results from an Interface Displacement Model*, Physica A **183**, 439 (1992); J. O. Indekeu and A. Robledo, *Hyperscaling and Nonclassical exponents for the Line Tension at wetting*, Phys. Rev. E **47**, 4607 (1993).
- [10] Y. H. Taguchi and H. Takayasu, Europhys. Lett. **30**, 499 (1995).
- [11] D. C. Clayton, *Maxwellian relative energies and solar neutrinos*, Nature **249**, 131 (1974).
- [12] N. A. Bahcall and S. P. Oh, Astrophys. J. **462**, L49 (1996).
- [13] C. Tsallis, *Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics*, J. Stat. Phys. **52**, 479 (1988).
- [14] <http://tsallis.cat.cbpf.br/biblio.htm>
Para obter uma bibliografia atualizada sobre mecânica estatística generalizada.
- [15] C. Tsallis, S. V. F. Levy, A. M. C. Souza and R. Maynard, *Statistical-mechanical foundation of the ubiquity of Levy distributions in nature*, Phys. Rev. Lett. **75**, 3589 (1995); Erratum: **77**, 5442 (1996); D. H. Zanette and P. A. Alemany, *Thermodynamics of anomalous diffusion*, Phys. Rev. Lett. **75**, 366 (1995); M. O. Caceres and C. E. Budde, *Comment on Thermodynamics of anomalous diffusion*, Phys. Rev. Lett. **77**, 2589 (1996); D. H. Zanette and P. A. Alemany, *Reply to Comment on Thermodynamics of anomalous diffusion*, Phys. Rev. Lett. **77**, 2590 (1996).

- [16] A. R. Plastino and A. Plastino, *Non-extensive statistical mechanics and generalized Fokker-Planck equation*, Phys. Lett. A **222** 347 (1995); C. Tsallis and D.J. Bukman, *Anomalous diffusion in the presence of external forces: exact time-dependent solutions and their thermostistical basis*, Phys. Rev. E **54** R2197 (1996); L. Borland, *Microscopic dynamics of the nonlinear Fokker-Planck equation: A phenomenological model*, Phys. Rev. E **57**, 6634 (1998).
- [17] B. M. Boghosian, *Thermodynamic description of the relaxation of two-dimensional turbulence using Tsallis statistics*, Phys. Rev. E **53**, 4754 (1996); C. Tsallis, A. M. C. de Souza, *Nonlinear inverse bremsstrahlung absorption and nonextensive thermostistics*, Phys. Lett. A **235**, 444 (1997).
- [18] A. R. Plastino and A. Plastino, *Stellar polytropes and Tsallis' entropy*, Phys. Lett. A **174**, 384 (1993); J. J. Aly, *Proceedings of N-Body Problems and Gravitational Dynamics, Aussois, France* ed F. Combes and E. Athanassoula (Publications de l'Observatoire de Paris, Paris, 1993) p. 19.
- [19] V. H. Hamity and D. E. Barraco, *Generalized nonextensive thermodynamics applied to the cosmic background radiation in a Robertson-Walker universe*, Phys. Rev. Lett. **76**, 4664 (1996).
- [20] L. P. Chimento, J. Math. Phys., *Form invariance of differential equations in general relativity*, **38**, 2565 (1997).
- [21] D. F. Torres, H. Vucetich and A. Plastino, *Early universe test of nonextensive statistics*, Phys. Rev. Lett. **79**, 1588 (1997); [Erratum: 80, 3889 (1998)].

- [22] C. Tsallis, F. C. Sá Barreto and E. D. Loh, *Generalization of the Planck radiation law and application to the microwave background radiation*, Phys. Rev. E **52**, 1447 (1995).
- [23] A. Lavagno, G. Kaniadakis, M. Rego-Monteiro, P. Quarati and C. Tsallis, *Nonextensive thermostistical approach of the peculiar velocity function of galaxy clusters*, Astro. Lett. and Comm. **35**, 449 (1998).
- [24] A. K. Rajagopal, *Dynamic linear response theory for a nonextensive system based on the Tsallis prescription*, Phys. Rev. Lett. **76**, 3469 (1996).
- [25] I. Koponen, *Thermalization of electron-phonon system in nonequilibrium state characterized by fractal distribution of phonon excitations*, Phys. Rev. E **55**, 7759 (1997).
- [26] P. Jund, S. G. Kim and C. Tsallis, *Crossover from extensive to nonextensive behavior driven by long-range interactions*, Phys. Rev. B **52**, 50 (1995).
- [27] M. L. Lyra and C. Tsallis, *Nonextensivity and multifractality in low-dimensional dissipative systems*, Phys. Rev. Lett. **80**, 53 (1998).
- [28] C. Anteneodo and C. Tsallis, *Breakdown of Exponential Sensitivity to Initial Conditions: Role of the Range of interactions*, Phys. Rev. Lett. **80**, 5313 (1998).
- [29] A. Katz, *Principles of Statistical Mechanics : the information theory approach* (W. H. Freeman and Co., San Francisco, 1967).
- [30] G. S. S. Ávila, *Cálculo 3*, (LTC, Rio de Janeiro, 1982), p. 95.

- [31] E. M. F. Curado and C. Tsallis, *Generalized statistical mechanics: connection with thermodynamics*, J. Phys. A **24**, L69 (1991); Errata: **24**, 3187 (1991); **25**, 1019 (1992).
- [32] A.M. Mariz, *On the irreversible nature of the Tsallis and Renyi entropies*, Phys. Lett. A **165**, 409 (1992); A.R. Plastino and A. Plastino, *Tsallis' entropy, Ehrenfest theorem and information theory*, Phys. Lett. A **177**, 177 (1993); M. O. Caceres, *Irreversible thermodynamics in the framework of Tsallis entropy*, Phys. Lett. A **218**, 471 (1995); A. Chame and E. V. L. de Mello, *The Onsager reciprocity relations within Tsallis statistics*, Phys. Rev. Lett. A **228**, 159 (1997).
- [33] C. Tsallis, R. S. Mendes and A. R. Plastino, *Role of the constraints within generalized nonextensive statistics*, Physica A (1999), a ser publicado.
- [34] R. S. Mendes and I. T. Pedron, *Nonlinear differential equations based on Tsallis entropy and physical applications*, preprint.
- [35] K. R. Symon, *Mecânica* (Ed. Campus, Rio de Janeiro, 1982) p. 48.
- [36] S. W. Benson, *The Foundations of Chemical Kinetics* (Mc Graw-Hill, New York, 1960) p. 11
- [37] S. W. Benson, op. cit., p 25.
- [38] D. H. Zanette and P.A. Alemany, *Thermodynamics of Anomalous Diffusion*, Phys. Rev. Lett. **75**, 366 (1995).

- [39] C. Tsallis and D.J. Bukman, *Anomalous diffusion in the presence of external forces: exact time-dependent solutions and their thermostistical basis*, Phys. Rev. E **54** R2197 (1996).
- [40] J. Mathews and R. L. Walker, *Mathematical Methods of Physics* (Massachusetts: Addison-Wesley, 1973) p. 27.
- [41] A. B. Migdal, *Qualitative Methods in Quantum Theory* (W.A. Benjamin Inc., Massachusetts, 1977) p. 30.
- [42] L. Landau and E. Lifshitz, *Mécanique Quantique - Théorie Non Relativiste* (Ed. Mir, Moscou, 1966) p. 289.
- [43] J. Mathews and R. L. Walker, op. cit., p. 82.
- [44] R. P. Feynman, *Statistical Mechanics: A Set of Lectures* (W.A. Benjamin Inc., Massachusetts, 1974) p. 67.
- [45] E. K. Lenzi L. C. Malacarne and R. S. Mendes, *Perturbation and variational methods in nonextensive Tsallis statistics*, Phys. Rev. Lett. **80**, 218 (1998).
- [46] H. A. Bethe and R. W. Jackiw, *Intermediate Quantum Mechanics* (W.A. Benjamin Inc., Massachusetts, 1974) p. 83.
- [47] L. Landau and E. Lifshitz, op. cit., p. 286.