

**Realização do Processo de Exclusão Totalmente
Assimétrico em um Sistema de Partículas Brownianas
Interagentes**

José Eduardo de Oliveira

Março 2009

**Realização do Processo de Exclusão Totalmente Assimétrico em um
Sistema de Partículas Brownianas Interagentes**

José Eduardo de Oliveira

Orientador: Prof. Dr. Ronald Dickman

Projeto apresentado à Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para a
obtenção do grau de Mestre em Física.

Março 2009

À minha família.

Agradecimentos

- A Deus.
- À minha família, por sempre me apoiar nas minhas decisões.
- À Anna Lúcia, pelo amor, carinho e paciência.
- Ao Dickman, por confiar a mim esse trabalho, pelas ótimas dicas e úteis discussões semanais.
- Aos meus amigos, por existirem. Não vou citá-los. Não que sejam muitos, mas tenho medo de esquecer alguém.
- Aos colegas de curso, pela companhia.
- Aos meus professores, pelos ensinamentos.
- Ao CNPq, pela bolsa.

Resumo

Estudamos uma versão em espaço contínuo do processo de exclusão totalmente assimétrico (TASEP - *totally asymmetric simple exclusion process*), consistindo de partículas brownianas interagentes sujeitas a uma força constante em um potencial externo periódico. No TASEP em uma dimensão com condições de contorno abertas, as partículas são inseridas com uma taxa α no primeiro sítio da esquerda de uma rede unidimensional, pulam para a direita com uma taxa unitária (contanto que o sítio à sua direita esteja vazio) e são removidas com uma taxa β no último sítio da direita. Este modelo exhibe três fases distintas no plano $\alpha - \beta$. Nosso estudo do modelo contínuo é motivado por recentes experimentos envolvendo partículas coloidais numa rede de pinças ópticas, tais experimentos oferecem uma possível realização no laboratório do TASEP. No nosso modelo, o potencial externo é da mesma forma que o potencial gerado pela rede de pinças ópticas. As partículas ficam mais tempo próximas do mínimo do potencial, aproximando da situação no gás de rede. Uma interação repulsiva de curto alcance impede que as partículas ocupem o mesmo mínimo de potencial. A força constante, representando o arrasto do tipo Stokes que surge em partículas mergulhadas num fluido em movimento, leva a um movimento tendencioso, como no modelo em rede. Estudamos o modelo via integração numérica da equação de Langevin e simulações de Monte Carlo dinâmico. Nossos resultados para os perfis de densidade e a corrente indicam que o modelo em espaço contínuo exhibe transições de fase análogas às transições contínuas e descontínuas observadas no modelo em rede.

Abstract

We study a continuous-space version of the totally asymmetric simple exclusion process (TASEP), consisting of interacting Brownian particles subject to a driving force in a periodic external potential. In the one-dimensional TASEP with open boundaries, particles are inserted at the leftmost site at rate α , hop to the right at unit rate (as long as the target site is empty), and are removed at the rightmost site at rate β . This model exhibits three distinct phases in the $\alpha - \beta$ plane. Our study of a continuous-space model is motivated by recent experiments on colloidal particles in optical tweezer arrays, which offer the promise of a laboratory realization of the TASEP. The external potential in our model is of the form generated by such an array. Particles spend most of the time near potential minima, approximating the situation in the lattice gas. A short-range repulsive interaction prevents two particles from occupying the same potential well. A constant driving force, representing Stokes drag on particles suspended in a moving fluid, leads to biased motion, as in the lattice model. We study the model via numerical integration of the Langevin equation and dynamic Monte Carlo simulations. Our results for the density profile and current indicate that the continuous-space model exhibits phase transitions analogous to the continuous and discontinuous transitions observed in the lattice model.

Sumário

| | |
|---|--------|
| Agradecimentos | p. iii |
| Resumo | p. iv |
| Abstract | p. v |
| Lista de Figuras | p. ix |
| Lista de Tabelas | p. xi |
| Introdução | p. 1 |
| 1 Solução Exata do TASEP Usando Formulação Matricial | p. 3 |
| 1.1 Definição do Modelo e Estado Estacionário | p. 3 |
| 1.2 Prova de Estacionaridade | p. 8 |
| 1.3 Tamanho e Formas das Matrizes | p. 14 |
| 1.4 Resultados Exatos para Sistemas Finitos | p. 19 |
| 1.5 As Formas Assintóticas de $\langle W C^N V\rangle$ | p. 23 |
| 1.6 A Corrente e o Diagrama de Fase | p. 25 |
| 1.7 A Densidade $\langle \tau_i \rangle_N$ Longe das Fronteiras | p. 26 |
| 2 As Equações de Langevin e de Fokker-Planck | p. 30 |
| 2.1 A Equação de Langevin | p. 30 |
| 2.1.1 Movimento Browniano e a Equação de Langevin | p. 30 |
| 2.1.2 Solução da Equação de Langevin | p. 33 |

| | | |
|--|---|--------------|
| 2.1.3 | Deslocamento Quadrático Médio | p. 36 |
| 2.1.4 | Integração Numérica da Equação de Langevin | p. 37 |
| 2.2 | A Equação de Fokker-Planck | p. 40 |
| 2.2.1 | Equação de Movimento para a Distribuição de Probabilidade | p. 40 |
| 2.2.2 | Obtendo a Equação de Fokker-Planck | p. 42 |
| 2.2.3 | Equações de Kramers e de Smuluchowski | p. 44 |
| 3 | Redes de Pinças Ópticas | p. 45 |
| 3.1 | A Pinça Óptica | p. 45 |
| 3.2 | Partículas Coloidais em Redes de Pinças Ópticas | p. 48 |
| 4 | Versão Contínua do TASEP | p. 50 |
| 4.1 | O Esquema Experimental do TASEP | p. 50 |
| 4.2 | O Modelo em Espaço Contínuo | p. 51 |
| 4.2.1 | Energias Potenciais | p. 53 |
| 4.2.2 | Dimensões Físicas do Modelo | p. 56 |
| 4.2.3 | Atribuindo Valores às Constantes | p. 57 |
| 4.2.4 | Discretizando e Integrando a Equação de Langevin | p. 60 |
| 4.3 | Simulação de Monte Carlo Dinâmico | p. 62 |
| 5 | Resultados | p. 65 |
| 5.1 | Integração da Equação de Langevin | p. 65 |
| 5.2 | Simulação de Monte Carlo | p. 69 |
| 6 | Conclusões e Perspectivas | p. 82 |
| Apêndice A – Prova das Expressões (1.53) e (1.54) | | p. 83 |
| A.1 | Dedução da Expressão (1.53) | p. 83 |
| A.2 | Dedução da Expressão (1.54) | p. 88 |

Apêndice B – Prova da Expressão (1.61)

p. 90

Referências Bibliográficas

p. 96

Lista de Figuras

| | | |
|------|--|-------|
| 1.1 | Diagrama de fase do TASEP em rede | p. 27 |
| 2.1 | Linha de integração | p. 35 |
| 3.1 | Esquema da pinça óptica. | p. 47 |
| 3.2 | Fracionamento óptico. | p. 49 |
| 4.1 | Esquema experimental do TASEP | p. 51 |
| 4.2 | Rede de poços gaussianos | p. 53 |
| 4.3 | Poço gaussiano | p. 54 |
| 4.4 | Gráfico da energia potencial gaussiana | p. 55 |
| 4.5 | Duas esferas em poços adjacentes | p. 57 |
| 4.6 | Potencial efetivo | p. 58 |
| 4.7 | Trajetória de uma partícula. | p. 61 |
| 5.1 | Perfis de densidade para $\beta = 0,2$ e $\beta = 0,4$ | p. 66 |
| 5.2 | Densidade do sistema para $\beta = 0,2$ e $\beta = 0,4$ | p. 67 |
| 5.3 | Perfis de densidade e densidade do sistema para $\beta = 0,8$ | p. 68 |
| 5.4 | Perfis de Monte Carlo e de Langevin para $\beta = 0,4$ | p. 69 |
| 5.5 | Densidade de partículas em função do tempo para $L = 200$ | p. 71 |
| 5.6 | Perfis de densidade com $\alpha = 0,7$ e $\beta = 0,6$ para tamanhos diferentes. | p. 71 |
| 5.7 | Densidade do sistema para $\beta = 0,4$ em sistemas de tamanhos diferentes. | p. 72 |
| 5.8 | Densidade e corrente para $L = 200$ e α fixo. | p. 73 |
| 5.9 | Densidade e corrente de saturação para $\beta = 0,8$ e $\beta = 1,0$ | p. 75 |
| 5.10 | Densidade do sistema para $\alpha = 0,8$ em sistemas de tamanhos diferentes. | p. 75 |
| 5.11 | Densidade e corrente para $L = 200$ e β fixo. | p. 76 |

| | | |
|------|--|-------|
| 5.12 | Diagrama de fase do TASEP em espaço contínuo. | p. 78 |
| 5.13 | Corrente em função da densidade | p. 79 |
| 5.14 | Variância da densidade em $L = 200$ para α e β fixos. | p. 80 |
| 5.15 | Energias potenciais externa e de interação por partícula. | p. 81 |

Lista de Tabelas

- 5.1 Valores de saturação da densidade e da corrente para $\alpha = 0,8$ e $0,1$ p. 74
- 5.2 Pontos de transição de fase. p. 78

Introdução

O gás de rede forçado, ou sistema difusivo forçado, com condições de contorno abertas corresponde a um sistema de partículas interagentes que saltam numa direção preferencial de uma rede cujas extremidades estão conectadas a reservatórios de partículas com densidades constantes. Assim, uma corrente estacionária é mantida e o sistema nunca atinge o equilíbrio. Este tipo de sistema é o protótipo para estudos de estados estacionários fora do equilíbrio [1].

Um exemplo bem conhecido de sistema difusivo forçado, que se tornou um dos modelos padrões da mecânica estatística fora do equilíbrio, é o processo de exclusão totalmente assimétrico (TASEP do inglês *totally asymmetric simple exclusion process*). Este modelo já foi usado, principalmente, em estudos de cinética da síntese de proteínas [2-4] e modelagem de fluxo no tráfego de veículos [5-7]. Do ponto de vista matemático o modelo é de interesse na teoria de sistemas de partículas interagentes porque, apesar da sua simplicidade, apresenta um comportamento não-trivial [8, 9].

Nós estudamos a versão do TASEP com condições de contorno abertas. No modelo as partículas pulam somente para a direita com uma interação de caroço duro ao longo de uma rede unidimensional. As condições de contorno abertas significam que as partículas são inseridas (com uma taxa α) em uma extremidade da rede e removidas (com uma taxa β) no lado oposto.

O TASEP exhibe três fases distintas no plano $\alpha - \beta$ que já foram determinadas exatamente [10, 11]. Quando $\alpha > \beta$ e $\beta < \frac{1}{2}$ temos a fase de alta densidade (taxa de inserção é maior que a taxa de remoção). Se $\alpha < \frac{1}{2}$ e $\beta > \alpha$ temos a fase de baixa densidade. E, por último, quando $\alpha > \frac{1}{2}$ e $\beta > \frac{1}{2}$ temos a fase de corrente máxima. A transição de fase é descontínua ao longo da linha $\alpha = \beta < \frac{1}{2}$ e contínua para as linhas em $\alpha > \frac{1}{2}$ e $\beta = \frac{1}{2}$ e em $\alpha = \frac{1}{2}$ e $\beta > \frac{1}{2}$. O método para obter a solução analítica do TASEP em uma dimensão é reproduzido em detalhes no Cap. 1.

Como veremos no Cap. 3, o surgimento das chamadas redes de pinças ópticas possibilitou a investigação da dinâmica de partículas coloidais num potencial externo periódico [12-17]. O movimento das partículas coloidais no potencial periódico, para tempos longos e fricção baixa, consiste de saltos entre mínimos de potencial adjacentes. Portanto, existe uma certa corres-

pondência entre os experimentos com partículas coloidais em redes de piça óptica e o TASEP, que pode levar a possíveis verificações experimentais dos resultados do TASEP. Motivados pela possibilidade de realizar o TASEP no laboratório, propomos um modelo no espaço contínuo equivalente ao TASEP em rede.

O TASEP em espaço contínuo equivale a simulação de um experimento que pode ser realizado no laboratório para verificar o TASEP em rede. Experimentalmente, o modelo corresponde a um fluido, que contém partículas coloidais mergulhadas nele, escoando com velocidade constante num tubo uni-dimensional. O diâmetro do tubo é da ordem de grandeza do diâmetro da partícula sendo possível somente uma partícula de cada vez passar pela secção reta do tubo. Dentro do tubo existe um potencial externo periódico criado pela rede de pinças ópticas. As partículas tendem a ficar mais tempo próximas do mínimo desse potencial, isso corresponde no modelo em rede a partículas presas nos sítios.

A fim de simular o experimento descrito acima, estudamos um sistema de partículas brownianas interagentes sujeitas a um potencial externo periódico e a uma força externa constante. A força externa constante corresponde à tendência das partículas pularem para a direita no modelo em rede e surge, nos experimentos, devido à velocidade do fluido. Para evitar que mais de uma partícula ocupe o mesmo mínimo de potencial, inserimos interações repulsivas de curto alcance entre partículas vizinhas. Para a simulação computacional do TASEP em espaço contínuo usamos a integração numérica da equação de Langevin e o método de Monte Carlo dinâmico. O método de Langevin é abordado no Cap. 2, enquanto que maiores detalhes da definição do modelo e da aplicação dos métodos de Langevin e de Monte Carlo ao mesmo são encontrados no Cap. 4.

O TASEP em espaço contínuo apresenta transições de fase análogas às transições contínuas e descontínuas presentes no modelo em rede. Determinando os pontos onde ocorrem essas transições encontramos o diagrama de fase do modelo que também é equivalente ao diagrama de fase do modelo em rede. É importante citar que, apesar da grande similaridade entre o modelo em espaço contínuo e o modelo em rede, o modelo em espaço contínuo não apresenta a simetria partícula-buraco do modelo em rede. Resultados que comprovam essas afirmações e mostram outras características importantes do TASEP em espaço contínuos são apresentados no Cap.5, enquanto que as conclusões desse trabalho e as perspectivas para trabalhos futuros são delineadas no Cap. 6.

1 Solução Exata do TASEP Usando Formulação Matricial

Em 1993, Derrida *et al.* [11] publicaram o famoso trabalho onde usaram um produto de matrizes para representar o estado estacionário do TASEP (totaly asymmetric simple exclusion process) e, a partir daí, obter a solução exata para o modelo. Neste capítulo faremos uma descrição mais pormenorizada deste trabalho com o objetivo de apresentar as contas de uma maneira mais clara (abrindo mais as passagens onde julgarmos ser necessário) e, ao mesmo tempo, reforçar a importância e a simplicidade do método que dá a solução exata do TASEP em uma dimensão.

O estado estacionário do TASEP pode ser obtido exatamente como uma relação simples de recorrência no tamanho do sistema [18, 19, 20, 8]. Esta relação foi usada para calcular, no estado estacionário, expressões para o perfil de densidade e para funções correlações de ordem maior [18, 21]. A solução do TASEP apresentada aqui foi inspirada em técnicas usadas no estudo de sistemas integráveis [22, 23]. O método consiste em representar os pesos das configurações no estado estacionário como o produto de matrizes que não comutam entre si. Essa técnica já foi aplicada a problemas de *directed lattice animals* [24] e cadeias de spins quânticos antiferromagnéticos [25, 26]. Para o TASEP esta técnica simplifica a derivação dos resultados anteriores [18, 21] e facilita a sua generalização.

1.1 Definição do Modelo e Estado Estacionário

Vamos definir a dinâmica do Processo de Exclusão Totalmente Assimétrico (TASEP) em uma dimensão com condições de contorno abertas. Vamos usar a notação τ_i para indicar a variável de ocupação de cada sítio i ($1 \leq i \leq N$) de uma rede unidimensional de N sítios. Se o sítio i estiver ocupado por uma partícula, $\tau_i = 1$ e se estiver vazio, $\tau_i = 0$. Durante cada intervalo infinitesimal de tempo dt , cada partícula no sistema tem a probabilidade dt de saltar para o sítio a sua direita (isto é válido para todo sítio i tal que $1 \leq i \leq N - 1$) desde que o sítio alvo esteja

vazio. Além disso, uma partícula é adicionada no primeiro sítio ($i = 1$) com probabilidade αdt se o sítio 1 estiver vazio e uma partícula é removida do sítio N com probabilidade βdt se esse sítio estiver ocupado. Assim, se o sistema está na configuração $(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N)$ no tempo t , a sua configuração no tempo $t + dt$ será

$$\tau_1(t + dt) = \begin{cases} 1 & \text{com probabilidade } p_1 = \tau_1 + [\alpha(1 - \tau_1) - \tau_1(1 - \tau_2)]dt \\ 0 & \text{com probabilidade } 1 - p_1 \end{cases} \quad (1.1)$$

para $i = 1$,

$$\tau_i(t + dt) = \begin{cases} 1 & \text{com probabilidade } p_i = \tau_i + [\tau_{i-1}(1 - \tau_i) - \tau_i(1 - \tau_{i+1})]dt \\ 0 & \text{com probabilidade } 1 - p_i \end{cases} \quad (1.2)$$

para $2 \leq i \leq N - 1$ e

$$\tau_N(t + dt) = \begin{cases} 1 & \text{com probabilidade } p_N = \tau_N + [\tau_{N-1}(1 - \tau_N) - \beta\tau_N]dt \\ 0 & \text{com probabilidade } 1 - p_N \end{cases} \quad (1.3)$$

para $i = N$.

Podemos entender as equações anteriores da seguinte forma. A probabilidade de um sítio estar ocupado no tempo $t + dt$ é a soma da probabilidade do sítio estar ocupado no tempo t (que é a variável de ocupação do sítio $\tau_i(t)$) com a probabilidade de entrar uma partícula no sítio menos a probabilidade de sair uma partícula do sítio. Note que o fator $\tau_{i-1}(1 - \tau_i)$ garante que este termo é nulo se o sítio i estiver ocupado e/ou se o sítio $i - 1$ estiver vazio, casos onde não é possível que uma partícula entre no sítio i . O mesmo vale para o termo de probabilidade de saída de uma partícula $\tau_i(1 - \tau_{i+1})$ que é nulo para os casos onde não é possível que uma partícula deixe o sítio i (sítio i vazio e/ou $i + 1$ ocupado). Note os casos especiais $i = 1$ e $i = N$ onde a probabilidade de inserção é $\alpha(1 - \tau_1)dt$ e a probabilidade de remoção é $\beta\tau_N dt$, respectivamente.

No limite de tempos grandes, o sistema atinge o estado estacionário, onde a distribuição $P_N(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N)$, que dá a probabilidade de encontrar o sistema na configuração $(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N)$, é estacionária, isto é, satisfaz

$$\frac{d}{dt}P_N(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N) = 0. \quad (1.4)$$

O método de representar os pesos $P_N(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N)$ do estado estacionário por um produto de matrizes que não comutam entre si fornece expressões exatas para para todos os $P_N(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N)$. É mais conveniente usar pesos não normalizados que são iguais a

$P_N(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N)$ multiplicado por uma constante (independente da configuração):

$$P_N(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N) = f_N(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N)/Z_N \quad (1.5)$$

com

$$Z_N = \sum_{\tau_1=0,1} \cdots \sum_{\tau_N=0,1} f_N(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N). \quad (1.6)$$

Por analogia com outros modelos de solução exata [24, 25, 26], como será mostrado na seção seguinte, podemos obter $f_N(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N)$ no estado estacionário da seguinte expressão:

$$f_N(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N) = \langle W | \prod_{i=1}^N [\tau_i D + (1 - \tau_i) E] | V \rangle, \quad (1.7)$$

onde D e E são matrizes quadradas e $|V\rangle$ e $\langle W|$ são vetores que satisfazem as seguintes relações:

$$DE = D + E \quad (1.8)$$

$$D|V\rangle = \frac{1}{\beta} |V\rangle \quad (1.9)$$

$$\langle W|E = \frac{1}{\alpha} \langle W|. \quad (1.10)$$

A expressão (1.7) significa simplesmente que o peso $f_N(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N)$ é dado por um produto de N matrizes D ou E com a matriz D na posição i se o sítio i estiver ocupado ($\tau_i = 1$) e a matriz E se o sítio i estiver vazio ($\tau_i = 0$). É importante ressaltar que as equações (1.7)-(1.10) são a essência da técnica e todos os resultados das seções seguintes são conseqüências diretas delas.

Para mostrar as vantagens desta técnica vamos definir a matriz C como

$$C = D + E. \quad (1.11)$$

Definindo a densidade média no sítio i como

$$\langle \tau_i \rangle_N = \frac{\sum_{\tau_1=0,1} \cdots \sum_{\tau_N=0,1} \tau_i f_N(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N)}{\sum_{\tau_1=0,1} \cdots \sum_{\tau_N=0,1} f_N(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N)} \quad (1.12)$$

e substituindo $f_N(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N)$ dado por (1.7) temos

$$\langle \tau_i \rangle_N = \frac{\sum_{\tau_1=0,1} \cdots \sum_{\tau_N=0,1} \tau_i \langle W | \prod_{j=1}^N [\tau_j D + (1 - \tau_j) E] | V \rangle}{\sum_{\tau_1=0,1} \cdots \sum_{\tau_N=0,1} \langle W | \prod_{j=1}^N [\tau_j D + (1 - \tau_j) E] | V \rangle}. \quad (1.13)$$

Agora vamos somar a expressão acima na variável τ_1 (lembrando que quando $\tau_1 = 1$ temos uma matriz D na posição 1 e quando $\tau_1 = 0$ temos uma matriz E) para obter

$$\langle \tau_i \rangle_N = \frac{\sum_{\tau_2=0,1} \cdots \sum_{\tau_N=0,1} \tau_i \langle W | C \prod_{j=2}^N [\tau_j D + (1 - \tau_j) E] | V \rangle}{\sum_{\tau_2=0,1} \cdots \sum_{\tau_N=0,1} \langle W | C \prod_{j=2}^N [\tau_j D + (1 - \tau_j) E] | V \rangle} \quad (1.14)$$

onde usamos a definição $C = D + E$. Sempre que somarmos sobre τ_j para $j < i$ aparecerá uma matriz $C = D + E$ na posição j . Isto quer dizer que podemos fazer

$$\langle \tau_i \rangle_N = \frac{\sum_{\tau_i=0,1} \cdots \sum_{\tau_N=0,1} \tau_i \langle W | C^{i-1} \prod_{j=i}^N [\tau_j D + (1 - \tau_j) E] | V \rangle}{\sum_{\tau_i=0,1} \cdots \sum_{\tau_N=0,1} \langle W | C^{i-1} \prod_{j=i}^N [\tau_j D + (1 - \tau_j) E] | V \rangle}. \quad (1.15)$$

Quando somamos em τ_i , o fator τ_i no numerador anula o termo da soma correspondente a $\tau_i = 0$ (o termo que contém a matriz E) e, portanto, o resultado da soma será apenas uma matriz D na posição i . Mas note que o fator τ_i não aparece no denominador, o que implica que a soma em τ_i no denominador continuará dando uma matriz C . Sendo assim temos

$$\langle \tau_i \rangle_N = \frac{\sum_{\tau_{i+1}=0,1} \cdots \sum_{\tau_N=0,1} \langle W | C^{i-1} D \prod_{j=i+1}^N [\tau_j D + (1 - \tau_j) E] | V \rangle}{\sum_{\tau_{i+1}=0,1} \cdots \sum_{\tau_N=0,1} \langle W | C^i \prod_{j=i+1}^N [\tau_j D + (1 - \tau_j) E] | V \rangle}. \quad (1.16)$$

Agora fica fácil somar no restante das variáveis, pois sabemos que cada soma resultará numa matriz C . Com isso, concluímos que $\langle \tau_i \rangle_N$ pode ser calculado da seguinte expressão

$$\langle \tau_i \rangle_N = \frac{\langle W | C^{i-1} D C^{N-i} | V \rangle}{\langle W | C^N | V \rangle}. \quad (1.17)$$

A relação acima é facilmente entendida quando percebemos que as somas em (1.13) podem ser fatoradas e que cada soma resulta numa matriz C na posição da soma exceto a soma correspondente a τ_i que resulta numa matriz D na posição i . Da mesma forma temos para $\langle (1 - \tau_i) \rangle_N$ uma matriz E na posição i e uma matriz C em cada uma das outras posições, o que resulta em

$$\langle (1 - \tau_i) \rangle_N = \frac{\langle W | C^{i-1} E C^{N-i} | V \rangle}{\langle W | C^N | V \rangle}. \quad (1.18)$$

Para funções correlação de ordem maior o raciocínio é o mesmo, por exemplo, para $i < j$:

$$\langle \tau_i \tau_j \rangle_N = \frac{\langle W | C^{i-1} D C^{j-i-1} D C^{N-j} | V \rangle}{\langle W | C^N | V \rangle}. \quad (1.19)$$

Portanto, se tivermos formas convenientes para as matrizes D e E e para os vetores $\langle W|$ e $|V\rangle$ de maneira que os elementos de qualquer potência de C tenham expressões simples, então as fórmulas para o perfil de densidade $\langle \tau_i \rangle_N$ e para funções correlação de ordens maiores $\langle \tau_i \dots \tau_j \rangle_N$ seguem imediatamente.

No estado estacionário pode-se obter uma hierarquia de relações entre as funções correlação das condições

$$\frac{d}{dt} \langle \tau_{i_1} \tau_{i_2} \dots \tau_{i_k} \rangle_N = 0. \quad (1.20)$$

Por exemplo, a condição de estacionaridade

$$\frac{d}{dt} \langle \tau_i \rangle_N = 0 \quad (1.21)$$

para todo $1 \leq i \leq N$ implica em

$$\alpha \langle W|EC^{N-1}|V\rangle = \dots = \langle W|C^{i-1}DEC^{N-i-1}|V\rangle = \dots = \beta \langle W|C^{N-1}D|V\rangle \quad (1.22)$$

A relação (1.22) representa a conservação de corrente de partículas. Cada igualdade expressa o fato de que a corrente média entre o sítio i e o sítio $i+1$ é independente de i para todo $1 \leq i \leq N$.

Antes de prosseguir vamos provar a relação (1.22) usando a condição (1.21). Note que a condição (1.21) é equivalente a

$$\langle \tau_i(t+dt) \rangle_N = \langle \tau_i(t) \rangle_N \quad (1.23)$$

e que $\langle \tau_i \rangle_N$ é dado por

$$\begin{aligned} \langle \tau_i \rangle_N &= 1 \times p_i + 0 \times (1 - p_i) \\ &= p_i \end{aligned}$$

onde p_i é dado pelas equações (1.1)-(1.3) substituindo-se os valores instantâneos por seus valores médios. Para $i = 1$ temos, da equação (1.1),

$$\langle \tau_1(t+dt) \rangle_N = \langle \tau_1(t) \rangle_N + [\alpha \langle (1 - \tau_1(t)) \rangle_N - \langle \tau_1(t) \rangle_N + \langle \tau_1(t)\tau_2(t) \rangle_N] dt$$

Aplicando (1.23), (1.17), (1.18), (1.19) na equação acima obtemos:

$$\alpha \langle W|EC^{N-1}|V\rangle = \langle W|D(C-D)C^{N-2}|V\rangle$$

Notando que $C - D = E$ obtemos

$$\alpha \langle W|EC^{N-1}|V\rangle = \langle W|DEC^{N-2}|V\rangle \quad (1.24)$$

Para $2 \leq i \leq N-1$ temos, da equação (1.2),

$$\langle \tau_i(t+dt) \rangle_N = \langle \tau_i(t) \rangle_N + [\langle \tau_{i-1}(t) \rangle_N - \langle \tau_{i-1}(t)\tau_i(t) \rangle_N - \langle \tau_i(t) \rangle_N + \langle \tau_i(t)\tau_{i+1}(t) \rangle_N]dt$$

e de (1.23) vemos que

$$\langle \tau_{i-1} \rangle_N - \langle \tau_{i-1}\tau_i \rangle_N = \langle \tau_i \rangle_N + \langle \tau_i\tau_{i+1} \rangle_N \quad (1.25)$$

e utilizando (1.17) e (1.19) obtemos:

$$\begin{aligned} \langle W|C^{i-2}DC^{N-i+1}|V \rangle - \langle W|C^{i-2}D^2C^{N-i}|V \rangle = \\ \langle W|C^{i-1}DC^{N-i}|V \rangle - \langle W|C^{i-1}D^2C^{N-i-1}|V \rangle. \end{aligned}$$

Rearranjando termos, temos

$$\langle W|C^{i-2}D(C-D)C^{N-i}|V \rangle = \langle W|C^{i-1}D(C-D)C^{N-i-1}|V \rangle$$

e usando $C-D=E$ chegamos a

$$\langle W|C^{i-2}DEC^{N-i}|V \rangle = \langle W|C^{i-1}DEC^{N-i-1}|V \rangle.$$

Note que para $i=2$ temos $\langle W|DEC^{N-2}|V \rangle = \langle W|CDEC^{N-3}|V \rangle$ e com a expressão (1.24) chegamos, por recorrência, a:

$$\alpha \langle W|EC^{N-1}|V \rangle = \langle W|C^{i-1}DEC^{N-i-1}|V \rangle \quad (1.26)$$

para todo $1 \leq i \leq N-1$. Da mesma forma, para $i=N$, temos da equação (1.3) e (1.23)

$$\langle \tau_{N-1} \rangle_N - \langle \tau_{N-1}\tau_N \rangle_N = \beta \langle \tau_N \rangle_N$$

e da equação (1.25) com $i=N-1$ obtemos $\langle \tau_{N-2} \rangle_N - \langle \tau_{N-2}\tau_{N-1} \rangle_N = \langle \tau_{N-1} \rangle_N + \langle \tau_{N-1}\tau_N \rangle_N$ e assim, concluímos que $\langle \tau_i \rangle_N + \langle \tau_i\tau_{i+1} \rangle_N = \beta \langle \tau_N \rangle_N$, ou melhor

$$\langle W|C^{i-1}DEC^{N-i-1}|V \rangle = \beta \langle W|C^{N-1}D|V \rangle \quad (1.27)$$

para todo $2 \leq i \leq N$. Com as equações (1.24), (1.26) e (1.27) provamos a igualdade (1.22).

1.2 Prova de Estacionaridade

Essa seção é dedicada à prova de que (1.7), com D , E , $\langle W|$ e $|V \rangle$ escolhidos para satisfazer as relações (1.8)-(1.10), realmente corresponde ao peso das configurações no estado estacionário.

A dinâmica do TASEP é descrita pela equação mestra do modelo. Vamos definir $P(n,t)$ como a probabilidade de o sistema estar na configuração n no tempo t e $H[n,m]$ como a taxa de transição da configuração m para a configuração n . A taxa de variação no tempo de $P(n,t)$ é dada pela solução da equação mestra

$$\frac{\partial}{\partial t}P(n,t) = \sum_{m \neq n} H[n,m]P(m,t) - \sum_{m \neq n} H[m,n]P(n,t) \quad (1.28)$$

onde o primeiro somatório corresponde a contribuições vindas de todas as possíveis transições de uma outra configuração m qualquer para a configuração n enquanto que o segundo somatório dá as contribuições vindas de todas as transições da configuração n para qualquer outra configuração m . Se definirmos os elementos diagonais da matriz H da seguinte forma:

$$H[n,n] = - \sum_{m \neq n} H[m,n] \quad (1.29)$$

podemos escrever a equação mestra de uma forma mais compacta:

$$\frac{\partial}{\partial t}P(n,t) = \sum_m H[n,m]P(m,t). \quad (1.30)$$

onde a soma em m é sobre todas as configurações possíveis.

A próxima etapa é construir as matrizes (cujos elementos são os $H[n,m]$) que representam as transições entre configurações. Note que a dinâmica para transições entre configurações dentro do sistema, ou seja, o salto de uma partícula do sítio i para o sítio $i+1$ com $1 \leq i \leq N-1$, é sempre a mesma independente dos sítios envolvidos, enquanto que a dinâmica nos sítios das fronteiras é diferente, devido a inserção e remoção. Assim, concluímos que existem três dinâmicas diferentes: inserção no primeiro sítio, remoção no último sítio e salto de partículas entre sítios vizinhos dentro do sistema. Vamos construir uma matriz de transição H para cada uma destas três dinâmicas.

Primeiro vamos construir a matriz h_1 que representa partículas entrando no sítio $i = 1$. Existem duas configurações possíveis $(0, \tau_2, \dots, \tau_N)$ e $(1, \tau_2, \dots, \tau_N)$, uma vez que o único sítio envolvido neste processo é o sítio 1. A única transição permitida pelo modelo é: $(0, \tau_2, \dots, \tau_N) \rightarrow (1, \tau_2, \dots, \tau_N)$ com taxa α (inserção de partículas). Utilizando a base $\{0; 1\} \equiv \{(0, \tau_2, \dots, \tau_N); (1, \tau_2, \dots, \tau_N)\}$ podemos escrever os elementos fora da diagonal como $h_1[1,0] = \alpha$ (taxa de transição da configuração $(0, \tau_2, \dots, \tau_N)$ para a configuração $(1, \tau_2, \dots, \tau_N)$) e $h_1[0,1] = 0$ (transição proibida pelo modelo). Da definição dos elementos da diagonal temos:

$h_1[0,0] = -h_1[1,0] = -\alpha$ e $h_1[1,1] = -h_1[0,1] = 0$. Assim podemos escrever a matriz h_1 como:

$$h_1 = \begin{pmatrix} -\alpha & 0 \\ \alpha & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.31)$$

Para remoção de partículas no último sítio, $i = N$, existem duas configurações possíveis $(\tau_1, \tau_2, \dots, 0)$ e $(\tau_1, \tau_2, \dots, 1)$, uma vez que o único sítio envolvido com remoção de partículas é o sítio N . Vamos definir a base para escrever a matriz h_N como $\{0;1\} \equiv \{(\tau_1, \dots, \tau_{N-1}, 0); (\tau_1, \dots, \tau_{N-1}, 1)\}$. Note que a única transição possível é de $1 \rightarrow 0$ com taxa β (remoção de partículas). Assim, temos $h_N[0,1] = \beta$ e, $h_N[1,1] = -h_N[0,1] = -\beta$ e $h_N[1,0] = -h_N[0,0] = 0$. Logo, a matriz que representa taxas de transição devido a saída de partículas do último poço é:

$$h_N = \begin{pmatrix} 0 & \beta \\ 0 & -\beta \end{pmatrix}. \quad (1.32)$$

A transição que ocorre devido ao salto de uma partícula entre sítios i e $i+1$ que não pertencem a extremidade é da configuração $(\tau_1, \dots, \tau_{i-1}, 1, 0, \tau_{i+2}, \dots, \tau_N)$ para a configuração $(\tau_1, \dots, \tau_{i-1}, 0, 1, \tau_{i+2}, \dots, \tau_N)$. Esta transição possui taxa unitária e é a única possível envolvendo estes dois sítios. Vamos usar a base $\{(0,0); (0,1); (1,0); (1,1)\}$, onde os quatro pares representam as quatro configurações que se obtém variando τ_i e τ_{i+1} , para escrever a matriz h que representa tais transições. Como a única transição possível é de $(1,0)$ para $(0,1)$, temos $h[(0,1), (1,0)] = 1$ e todos os outros elementos fora da diagonal nulos. Portanto, $h[(1,0), (1,0)] = -h[(0,1), (1,0)] = -1$ e os outros elementos da diagonal também são nulos. Escrevendo h na base acima temos:

$$h = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.33)$$

Resumindo, os únicos elementos não-nulos das matrizes de taxa de transição são

$$\begin{aligned} h_1[0,0] &= -\alpha & h_1[1,0] &= \alpha \\ h[(0,1), (1,0)] &= 1 & h[(1,0), (1,0)] &= -1 \\ h_N[0,1] &= \beta & h_N[1,1] &= -\beta. \end{aligned} \quad (1.34)$$

Agora escrevemos a equação mestra para P_N da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P_N(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N) &= \sum_{\sigma_1} h_1[\tau_1, \sigma_1] P_N(\sigma_1, \tau_2, \dots, \tau_N) \\ &+ \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{\sigma_i, \sigma_{i+1}} h[(\tau_i, \tau_{i+1}), (\sigma_i, \sigma_{i+1})] P_N(\sigma_1, \dots, \sigma_i, \sigma_{i+1}, \dots, \tau_N) \\ &+ \sum_{\sigma_N} h_N[\tau_N, \sigma_N] P_N(\tau_1, \dots, \tau_{N-1}, \sigma_N). \end{aligned} \quad (1.35)$$

Vamos supor que existem dois coeficientes x_0 e x_1 tais que as condições seguintes são satisfeitas para cada escolha de τ_i :

$$\sum_{\sigma_1} h_1[\tau_1, \sigma_1] P_N(\sigma_1, \tau_2, \dots, \tau_N) = x_{\tau_1} P_{N-1}(\tau_2, \dots, \tau_N) \quad (1.36)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{\sigma_i, \sigma_{i+1}} h[(\tau_i, \tau_{i+1}), (\sigma_i, \sigma_{i+1})] P_N(\tau_1, \dots, \sigma_i, \sigma_{i+1}, \dots, \tau_N) \\ = -x_{\tau_i} P_{N-1}(\tau_1, \dots, \tau_{i-1}, \tau_{i+1}, \dots, \tau_N) \\ + x_{\tau_{i+1}} P_{N-1}(\tau_1, \dots, \tau_i, \tau_{i+2}, \dots, \tau_N) \end{aligned} \quad (1.37)$$

$$\sum_{\sigma_N} h_N[\tau_N, \sigma_N] P_N(\tau_1, \dots, \sigma_N) = -x_{\tau_N} P_{N-1}(\tau_1, \dots, \tau_{N-1}). \quad (1.38)$$

Se tais coeficientes x_0 e x_1 existem então P_N dado pelas equações (1.36)-(1.38) representa o estado estacionário ($\partial P_N / \partial t = 0$). Para visualizar vamos escrever $\partial P_N / \partial t$ usando (1.36)-(1.38) para $N = 4$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P_4(\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4) &= x_{\tau_1} P_3(\tau_2, \tau_3, \tau_4) \\ &- x_{\tau_1} P_3(\tau_2, \tau_3, \tau_4) + x_{\tau_2} P_3(\tau_1, \tau_3, \tau_4) \\ &- x_{\tau_2} P_3(\tau_1, \tau_3, \tau_4) + x_{\tau_3} P_3(\tau_1, \tau_2, \tau_4) \\ &- x_{\tau_3} P_3(\tau_1, \tau_2, \tau_4) + x_{\tau_4} P_3(\tau_1, \tau_2, \tau_3) \\ &- x_{\tau_4} P_3(\tau_1, \tau_2, \tau_3) \\ &= 0. \end{aligned}$$

Note que para cada termo existe um igual mas de sinal oposto. Também não é difícil ver isso se substituirmos (1.36)-(1.38) em (1.35). Assim, todos os termos se cancelam e a soma em (1.35) dá zero, o que implica no estado estacionário. Portanto, o problema é reduzido a encontrar matrizes D , E e os vetores $\langle W | |V \rangle$ que satisfaçam as igualdades (1.36)-(1.38) quando substituirmos P_N (ou f_N) dado pela expressão (1.7).

Vamos fazer essa etapa passo a passo. Primeiro vamos substituir a expressão (1.7) na igual-

dade (1.36) para reescrevê-la como

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma_1=0,1} h_1[\tau_1, \sigma_1] \langle W | (\sigma_1 D + (1 - \sigma_1) E) \prod_{i=2}^N (\tau_i D + (1 - \tau_i) E) | V \rangle \\ = x_{\tau_1} \left[\langle W | \prod_{i=2}^N (\tau_i D + (1 - \tau_i) E) | V \rangle \right]. \end{aligned}$$

Note que o fator $\prod_{i=2}^N (\tau_i D + (1 - \tau_i) E) | V \rangle$ está presente em ambos os lados da equação. Então podemos igualar as duas partes diferentes que estão à esquerda desse fator e obter

$$\sum_{\sigma_1=0,1} h_1[\tau_1, \sigma_1] \langle W | (\sigma_1 D + (1 - \sigma_1) E) = x_{\tau_1} \langle W |$$

que, depois de efetuar a soma, resulta em

$$\langle W | (h_1[\tau_1, 0] E + h_1[\tau_1, 1] D) = x_{\tau_1} \langle W |. \quad (1.39)$$

Para $\tau_1 = 0$, sabemos de (1.31) ou de (1.34) que somente $h_1[0, 0] = -\alpha$ é diferente de zero o que implica que a equação acima resulta em $-\alpha \langle W | E = x_0 \langle W |$. Analogamente para $\tau_1 = 1$, o único elemento de h_1 não-nulo é $h_1[1, 0] = \alpha$, que aplicado em (1.39) dá a relação $\alpha \langle W | E = x_1 \langle W |$. Com isso obtemos a primeira condição sobre E e W :

$$\alpha \langle W | E = x_1 \langle W | = -x_0 \langle W |. \quad (1.40)$$

Note que esta relação é equivalente a igualdade (1.36). Continuando, vamos substituir a expressão (1.7) na igualdade (1.37) para reescrevê-la, para $1 \leq i \leq N - 1$, da seguinte forma

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma_i, \sigma_{i+1}=0,1} h[(\tau_i, \tau_{i+1}), (\sigma_i, \sigma_{i+1})] \langle W | \prod_{j=1}^{i-1} (\dots) \times \\ [\sigma_i D + (1 - \sigma_i) E] [\sigma_{i+1} D + (1 - \sigma_{i+1}) E] \prod_{j=i+2}^N (\dots) | V \rangle \\ = -x_{\tau_i} \left[\langle W | \prod_{j \neq i}^N (\dots) | V \rangle \right] + x_{\tau_{i+1}} \left[\langle W | \prod_{j \neq i+1}^N (\dots) | V \rangle \right] \end{aligned}$$

onde (\dots) representa $(\tau_j D + (1 - \tau_j) E)$. Vamos passar a soma presente no termo à esquerda do sinal de igualdade para dentro do produtório e reescrever o termo à direita de uma maneira

conveniente para obter

$$\begin{aligned} \langle W | \prod_{j=1}^{i-1} (\dots) \times \\ \left[\sum_{\sigma_i, \sigma_{i+1}=0,1} h[(\tau_i, \tau_{i+1}), (\sigma_i, \sigma_{i+1})] [\sigma_i D + (1 - \sigma_i) E] [\sigma_{i+1} D + (1 - \sigma_{i+1}) E] \right] \times \\ \prod_{j=i+2}^N (\dots) | V \rangle = \langle W | \prod_{j=1}^{i-1} (\dots) [-x_{\tau_i} (\tau_{i+1} D + (1 - \tau_{i+1}) E) + \\ x_{\tau_{i+1}} (\tau_i D + (1 - \tau_i) E)] \prod_{j=i+2}^N (\dots) | V \rangle \end{aligned}$$

onde juntamos os termos da direita em um só e escrevemos o termo resultante numa forma análoga ao termo da esquerda. Note que podemos igualar o termo entre colchetes do lado esquerdo com o termo entre colchetes do lado direito para obter a seguinte condição sobre as matrizes

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma_i, \sigma_{i+1}=0,1} h[(\tau_i, \tau_{i+1}), (\sigma_i, \sigma_{i+1})] [\sigma_i D + (1 - \sigma_i) E] [\sigma_{i+1} D + (1 - \sigma_{i+1}) E] \\ = -x_{\tau_i} (\tau_{i+1} D + (1 - \tau_{i+1}) E) + x_{\tau_{i+1}} (\tau_i D + (1 - \tau_i) E). \quad (1.41) \end{aligned}$$

Agora temos que efetuar a soma na equação acima para os quatro pares possíveis (τ_i, τ_{i+1}) e com atenção na equação (1.34) que dá os dois únicos termos de h que são diferentes de zero. Por essa razão, apesar do tamanho da expressão, as contas são bem simples. Para $(\tau_i, \tau_{i+1}) = (0, 0)$ todos os termos $h[(0, 0), (\sigma_i, \sigma_{i+1})]$ são nulos (primeira linha da matriz dada por (1.33)) independente dos valores de σ_i e σ_{i+1} . Isso significa que o lado esquerdo da igualdade da expressão acima é nulo. Substituindo $(\tau_i, \tau_{i+1}) = (0, 0)$ no lado direito temos $0 = -x_0 E + x_0 E$, que é automaticamente satisfeita. O mesmo acontece para $(\tau_i, \tau_{i+1}) = (1, 1)$, ou seja, todos os elementos da quarta linha da matriz h são nulos e o lado esquerdo da igualdade (1.41) é nulo. Neste caso temos $0 = -x_0 D + x_0 D$ que também é automaticamente satisfeita. Uma condição aparece para o par $(\tau_i, \tau_{i+1}) = (0, 1)$. Neste caso, os elementos que aparecem na soma pertencem à segunda linha da matriz h . De (1.34) sabemos que apenas $h[(0, 1), (1, 0)] = 1$ é diferente de zero, o que implica que (1.41) resulta na seguinte relação entre as matrizes D e E

$$DE = -x_0 D + x_1 E. \quad (1.42)$$

No caso onde $(\tau_i, \tau_{i+1}) = (1, 0)$ (a terceira linha da matriz h), o único elemento não nulo é $h[(1, 0), (1, 0)] = -1$ o que aplicado na equação (1.41) resulta na relação $-DE = x_0 D - x_1 E$, que é igual a (1.42).

Agora só falta substituir a expressão (1.7) na (1.38). Fazendo isso obtemos a igualdade

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma_N=0,1} h_N[\tau_N, \sigma_N] \langle W | \left[\prod_{i=1}^{N-1} (\tau_i D + (1 - \tau_i) E) \right] (\sigma_N D + (1 - \sigma_N) E) | V \rangle \\ = -x_{\tau_N} \langle W | \prod_{i=1}^{N-1} (\tau_i D + (1 - \tau_i) E) | V \rangle. \end{aligned}$$

Note que o fator $\langle W | \prod_{i=1}^{N-1} (\tau_i D + (1 - \tau_i) E)$ é comum aos dois lados da igualdade, isto implica que podemos colocá-lo em evidência e igualar as partes restantes para obter

$$\sum_{\sigma_N=0,1} h_N[\tau_N, \sigma_N] (\sigma_N D + (1 - \sigma_N) E) | V \rangle = -x_{\tau_N} | V \rangle.$$

Somando sobre σ_N obtemos

$$(h_N[\tau_N, 0] E + h_N[\tau_N, 1] D) | V \rangle = -x_{\tau_N} | V \rangle.$$

Para $\tau_N = 0$ (primeira linha da matriz h_N ver equação (1.32)), a expressão acima dá $\beta D | V \rangle = -x_0 | V \rangle$, pois, o único termo diferente de zero, é $h[0, 1] = \beta$. E, finalmente, para $\tau_N = 1$ (segunda linha da matriz h_N), obtemos $\beta D | V \rangle = x_1 | V \rangle$. Juntando estes dois resultados obtemos a última relação

$$\beta D | V \rangle = x_1 | V \rangle = -x_0 | V \rangle. \quad (1.43)$$

Das expressões (1.40) ou (1.43) obtemos $x_1 = -x_0$ e da expressão (1.42) vemos que o valor de x_1 pode ser mudado arbitrariamente pela multiplicação de D e E por uma mesma constante. Se escolhermos

$$x_1 = -x_0 = 1 \quad (1.44)$$

as equações (1.40), (1.42) e (1.43) se tornam idênticas a (1.8)-(1.10).

Note o poder desta técnica: provamos genericamente que as equações (1.7)-(1.10) representam o estado estacionário do modelo e agora basta encontrarmos formas convenientes para as matrizes D e E e os vetores $\langle W |$ e $| V \rangle$ de modo que os elementos de matriz de qualquer potência de $C = D + E$ tenham formas simples. Dessa forma expressões exatas para $\langle \tau_1 \rangle_N$ e para $\langle \tau_i \dots \tau_j \rangle_N$ serão obtidas facilmente.

1.3 Tamanho e Formas das Matrizes

Uma questão ainda não respondida é se podemos construir matrizes D e E e vetores $| V \rangle$ e $\langle W |$ que satisfaçam as relações (1.8)-(1.10). Mas antes de tudo nós temos que saber qual deve

ser o tamanho das matrizes. A seguir mostraremos que ou as matrizes são unidimensionais (quando $\alpha + \beta = 1$) ou elas são de dimensão infinita (quando $\alpha + \beta \neq 1$). Vamos distinguir dois casos, dependendo se D e E comutam ou não.

(i) Se D e E comutam ($DE = ED$), então (1.8)-(1.10) implicam que

$$\frac{1}{\alpha\beta} \langle W|V \rangle = \langle W|DE|V \rangle = \langle W|D+E|V \rangle = \left(\frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta} \right) \langle W|V \rangle. \quad (1.45)$$

Portanto se $\langle W|V \rangle \neq 0$, temos a igualdade $\frac{1}{\alpha\beta} = \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta}$, ou melhor, $\alpha + \beta = 1$. Neste caso, a forma mais conveniente que podemos escolher para D e E é $D = 1/\beta$ e $E = 1/\alpha$ (matrizes unidimensionais). Note que D e E escritas dessa forma satisfazem (1.8)-(1.10).

(ii) Se D e E não comutam, pode-se mostrar que as matrizes D e E devem ser de dimensão infinita do seguinte modo. Suponha que D e E têm dimensão finita e note que não existe um vetor $|v\rangle$ diferente de zero tal que $E|v\rangle = |v\rangle$ (se existisse $|v\rangle \neq 0$ teríamos $D|v\rangle = DE|v\rangle = (D+E)|v\rangle = D|v\rangle + |v\rangle$ o que implica que $|v\rangle = 0$). Esta expressão significa que a matriz E não possui autovalor unitário e, portanto, $E - 1$ não possui autovalor nulo, logo o determinante de $E - 1$ é diferente de zero e $E - 1$ é inversível. Da relação (1.8) calculamos D e obtemos $D = E(E - 1)^{-1}$, que comuta com E (pois $(E - 1)^{-1}$ comuta com E). Resumindo, se as matrizes D e E são finitas elas comutam entre si e, como isso vai contra a hipótese inicial, a única escolha é fazer D e E matrizes de dimensão infinita. A seguir, vamos apresentar exemplos de matrizes D e E infinitas que satisfazem as condições (1.8)-(1.10).

Há várias escolhas possíveis para as matrizes D e E . Uma delas é

$$D_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\beta} & \frac{1}{\beta} & \frac{1}{\beta} & \frac{1}{\beta} & \cdots \\ 0 & 1 & 1 & 1 & \\ 0 & 0 & 1 & 1 & \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad E_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix}. \quad (1.46)$$

É fácil verificar que

$$D_1 E_1 = D + E = \begin{pmatrix} \frac{1}{\beta} & \frac{1}{\beta} & \frac{1}{\beta} & \frac{1}{\beta} & \cdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \\ 0 & 1 & 1 & 1 & \\ 0 & 0 & 1 & 1 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix}.$$

Vamos encontrar $|V_1\rangle$ e $\langle W_1|$ que satisfaçam as condições (1.9) e (1.10). Vamos escrever $|V_1\rangle$ da

seguinte forma

$$|V_1\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

e substituir em (1.9) para obter

$$D_1 \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \frac{1}{\beta} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} \frac{1}{\beta} \sum_{i=1}^{\infty} a_i \\ \sum_{i=2}^{\infty} a_i \\ \sum_{i=3}^{\infty} a_i \\ \vdots \end{pmatrix} = \frac{1}{\beta} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

onde usamos D_1 dado por (1.46). A relação acima nos dá

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{\infty} a_i = a_1 & \longrightarrow \sum_{i=2}^{\infty} a_i = 0 \\ \sum_{i=n}^{\infty} a_i = \frac{a_n}{\beta} & \forall n \geq 2 \end{cases}$$

que resulta em a_1 qualquer e $a_n = 0$ para todo $n \geq 2$. Para $\langle W_1|$ escrevemos $\langle W_1| = (b_1, b_2, b_3, \dots)$ e usando E_1 dado pela equação (1.46) temos

$$(b_1, b_2, b_3, \dots) E_1 = \frac{1}{\alpha} (b_1, b_2, b_3, \dots) \Rightarrow (b_2, b_3, b_4, \dots) = \frac{1}{\alpha} (b_1, b_2, b_3, \dots)$$

de onde obtemos $b_{i+1} = \frac{b_i}{\alpha}$ o que dá $b_i = \frac{b_1}{\alpha^{i-1}}$ com b_1 arbitrário. Da normalização temos $\langle W_1|V_1\rangle = 1$, que implica em $a_1 b_1 = 1$ e uma escolha é $a_1 = b_1 = 1$. Assim, obtemos

$$\langle W_1| = \left(1, \frac{1}{\alpha}, \frac{1}{\alpha^2}, \dots\right) \quad |V_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (1.47)$$

que por construção satisfazem (1.9) e (1.10).

Existem várias outras escolhas para as matrizes D e E e os vetores $\langle W|$ e $|V\rangle$ que satisfazem (1.8)-(1.10). Podemos usar essa liberdade para deixar o cálculo dos elementos de matriz mais

diretos. Por exemplo, podemos usar

$$D_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 1 & 0 & \\ 0 & 0 & 1 & 1 & \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad E_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 1 & 0 & 0 & \\ 0 & 1 & 1 & 0 & \\ 0 & 0 & 1 & 1 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix}. \quad (1.48)$$

Note que

$$D_2 E_2 = D_2 + E_2 = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 2 & 1 & 0 & \\ 0 & 1 & 2 & 1 & \\ 0 & 0 & 1 & 2 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix}.$$

Podemos definir vetores genéricos $|V\rangle$ e $\langle W|$, assim como foi feito para D_1 e E_1 , e substituir D_2 e E_2 dados por (1.48) para obter

$$\begin{pmatrix} a_1 + a_2 \\ a_2 + a_3 \\ a_3 + a_4 \\ \vdots \end{pmatrix} = \frac{1}{\beta} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \Rightarrow a_{i+1} = \left(1 - \frac{1}{\beta}\right) a_i \Rightarrow a_i = a_1 \left(1 - \frac{1}{\beta}\right)^{i-1}$$

e

$$(b_1 + b_2, b_2 + b_3, b_3 + b_4, \dots) = \frac{1}{\alpha} (b_1, b_2, b_3, \dots) \Rightarrow b_i = b_1 \left(1 - \frac{1}{\alpha}\right)^{i-1}.$$

Com isso obtemos

$$\begin{aligned} \langle W_2 | V_2 \rangle &= a_1 b_1 \left[1 + \left(1 - \frac{1}{\alpha}\right) \left(1 - \frac{1}{\beta}\right) + \left(1 - \frac{1}{\alpha}\right)^2 \left(1 - \frac{1}{\beta}\right)^2 + \dots \right] \\ &= a_1 b_1 \sum_{n=0}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{\alpha}\right)^n \left(1 - \frac{1}{\beta}\right)^n = \frac{a_1 b_1}{1 - \left(1 - \frac{1}{\alpha}\right) \left(1 - \frac{1}{\beta}\right)}. \end{aligned}$$

sendo que a série converge para $(1 - 1/\alpha)(1 - 1/\beta) \leq 1$, ou melhor, para $\alpha + \beta \leq 1$. Esco-

lhendo $a_1 = b_1 \equiv \kappa$ e $\langle W_2|V_2\rangle = 1$ temos $\kappa = \sqrt{(\alpha + \beta - 1)/\alpha\beta}$ e os vetores

$$\langle W_2| = \kappa \left(1, \left(\frac{1}{\alpha} - 1\right), \left(\frac{1}{\alpha} - 1\right)^2, \dots \right) \quad |V_2\rangle = \kappa \begin{pmatrix} 1 \\ \left(\frac{1}{\beta} - 1\right) \\ \left(\frac{1}{\beta} - 1\right)^2 \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (1.49)$$

Ao contrário de (1.46) e (1.47) esta escolha mostra a simetria partícula-buraco do problema uma vez que as matrizes D_2 e E_2 tem formas similares e as condições de contorno α e β somente aparecem nos vetores $\langle W_2|$ e $|V_2\rangle$. Uma desvantagem da escolha (1.48) e (1.49) é que, devido à forma de $\langle W_2|$ e $|V_2\rangle$, deve-se somar séries geométricas para obter funções correlação e estas séries divergem para $\alpha + \beta \geq 1$. Contudo, ao menos para N finito, todas as expressões são funções racionais de α e β de modo que é possível obter resultados para $\alpha + \beta \geq 1$ por meio de continuação analítica a partir dos resultados para $\alpha + \beta \leq 1$.

Uma terceira possibilidade para a escolha de D , E , $\langle W|$ e $|V\rangle$ é

$$D_3 = \begin{pmatrix} 1/\beta & a & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 1 & 0 & \\ 0 & 0 & 1 & 1 & \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad E_3 = \begin{pmatrix} 1/\alpha & 0 & 0 & 0 & \dots \\ a & 1 & 0 & 0 & \\ 0 & 1 & 1 & 0 & \\ 0 & 0 & 1 & 1 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad (1.50)$$

$$\langle W_3| = (1, 0, 0, \dots) \quad |V_3\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (1.51)$$

É fácil verificar que as relações (1.9) e (1.10) são satisfeitas e que $\langle W_3|V_3\rangle = 1$. E temos ainda de (1.8) que $D_3E_3 = D_3 + E_3$ o que implica em

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\alpha\beta} + a^2 & a & 0 & 0 & \dots \\ a & 2 & 1 & 0 & \\ 0 & 1 & 2 & 1 & \\ 0 & 0 & 1 & 2 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta} & a & 0 & 0 & \dots \\ a & 2 & 1 & 0 & \\ 0 & 1 & 2 & 1 & \\ 0 & 0 & 1 & 2 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

e daí tiramos o valor da constante a

$$a^2 = \frac{\alpha + \beta - 1}{\alpha\beta}. \quad (1.52)$$

O fato de a^2 poder ser negativo ($\alpha + \beta < 1$) não é relevante, pois no cálculo dos elementos de matriz a constante a só aparece como a^2 . Note que para $\alpha = \beta = 1$ temos $a = 1$ e (1.50),(1.51) coincidem com a escolha (1.48),(1.49). Note também que para $\alpha + \beta = 1$ temos $a = 0$ de maneira que os elementos (1,1) das matrizes D_3 e E_3 desacoplam dos outros elementos (isto quer dizer que em produtos de matrizes o elemento (1,1) não aparece multiplicado por outro elemento de matriz a não ser o elemento (1,1)). Sendo assim, para o propósito de cálculo, D_3 torna-se unidimensional o que é suficiente para este caso especial de α e β .

1.4 Resultados Exatos para Sistemas Finitos

Na seção anterior apresentamos algumas formas possíveis para as matrizes e vetores D , E , $\langle W|$, $|V\rangle$. Contudo, é possível obter expressões para a densidade e para funções correlação de ordens maiores diretamente de (1.8)-(1.11) sem a necessidade de formas particulares para as matrizes. Como vimos em (1.17) e (1.19) o cálculo de qualquer grandeza de interesse exige primeiro expressões para $\langle W|C^N|V\rangle$ com N arbitrário e valores quaisquer de α e β . Existem muitas maneiras de se calcular esses elementos de matriz. Pode-se diagonalizar a matriz C dada por (1.46) ou (1.48) ou (1.50) (ou qualquer outra forma escolhida para as matrizes) e decompor os vetores $\langle W|$ e $|V\rangle$ nos autovetores de C . Ou pode-se usar métodos que envolvem função geratriz. Aqui vamos usar uma expressão para $\langle W|C^N|V\rangle$, válida para $N \geq 1$, que pode ser obtida diretamente das regras de comutação (1.8)-(1.10):

$$\langle W|C^N|V\rangle = \sum_{p=1}^N \frac{p(2N-1-p)!}{N!(N-p)!} \frac{(1/\beta)^{p+1} - (1/\alpha)^{p+1}}{1/\beta - 1/\alpha} \quad (1.53)$$

onde, na nossa convenção, a normalização é fixada para ser $\langle W|V\rangle = 1$. A prova da expressão acima é delineada no Apêndice A.1.

Apesar das contas serem fáceis e não acrescentarem nada, é interessante verificar a expressão (1.53) para alguns casos simples. Por exemplo, para $N = 1$

$$\langle W|C^N|V\rangle = \langle W|C|V\rangle = \langle W|(D+E)|V\rangle = \frac{1}{\beta} + \frac{1}{\alpha}$$

usando diretamente as relações (1.8)-(1.11) ou

$$\langle W|C|V \rangle = \frac{(1/\beta)^2 - (1/\alpha)^2}{1/\beta - 1/\alpha} = \frac{1}{\beta} + \frac{1}{\alpha}$$

usando a relação (1.53). Para $N = 2$

$$\begin{aligned} \langle W|C^N|V \rangle &= \langle W|C^2|V \rangle = \langle W|(D^2 + DE + ED + E^2)|V \rangle \\ &= \langle W|(D^2 + D + E + ED + E^2)|V \rangle \\ &= \frac{1}{\beta^2} + \frac{1}{\beta} + \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\alpha\beta} + \frac{1}{\alpha^2} \end{aligned}$$

usando diretamente as relações (1.8)-(1.11) ou

$$\begin{aligned} \langle W|C^2|V \rangle &= \sum_{p=1}^2 \frac{p(3-p)!}{2(2-p)!} \frac{(1/\beta)^{p+1} - (1/\alpha)^{p+1}}{1/\beta - 1/\alpha} \\ &= \frac{(1/\beta)^2 - (1/\alpha)^2}{1/\beta - 1/\alpha} + \frac{(1/\beta)^3 - (1/\alpha)^3}{1/\beta - 1/\alpha} \\ &= \frac{1}{\beta} + \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta^2} + \frac{1}{\alpha\beta} + \frac{1}{\alpha^2} \end{aligned}$$

usando a relação (1.53). Para $N = 3$

$$\begin{aligned} \langle W|C^3|V \rangle &= \langle W|(D+E)(D^2 + D + E + ED + E^2)|V \rangle \\ &= \langle W|(D^3 + 2D^2 + 2D + 2E + 2ED + 2E^2 + ED^2 + E^2D + E^3)|V \rangle \\ &= 2 \left[\frac{1}{\beta^2} + \frac{1}{\beta} + \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\alpha\beta} + \frac{1}{\alpha^2} \right] + \frac{1}{\beta^3} + \frac{1}{\alpha\beta^2} + \frac{1}{\alpha^2\beta} + \frac{1}{\alpha^3} \end{aligned}$$

usando diretamente as relações (1.8)-(1.11) ou

$$\begin{aligned} \langle W|C^3|V \rangle &= \sum_{p=1}^3 \frac{p(5-p)!}{3!(3-p)!} \frac{(1/\beta)^{p+1} - (1/\alpha)^{p+1}}{1/\beta - 1/\alpha} \\ &= 2 \left[\frac{(1/\beta)^2 - (1/\alpha)^2}{1/\beta - 1/\alpha} + \frac{(1/\beta)^3 - (1/\alpha)^3}{1/\beta - 1/\alpha} \right] + \frac{(1/\beta)^4 - (1/\alpha)^4}{1/\beta - 1/\alpha} \\ &= 2 \left[\frac{1}{\beta} + \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta^2} + \frac{1}{\alpha\beta} + \frac{1}{\alpha^2} \right] + \frac{1}{\beta^3} + \frac{1}{\alpha\beta^2} + \frac{1}{\alpha^2\beta} + \frac{1}{\alpha^3} \end{aligned}$$

usando a relação (1.53). Note que nas duas equações anteriores o termo entre colchetes é igual a $\langle W|C^2|V \rangle$, bastando substituir a expressão já calculada para $\langle W|C^2|V \rangle$ e fazer a divisão de polinômios para obter a última igualdade acima.

Para calcular o perfil de densidade e funções correlação de ordem maior é conveniente usar a seguinte relação que também é uma consequência direta das relações (1.8)-(1.11), válida para

$n \geq 1$

$$DC^n = \sum_{p=0}^{n-1} \frac{(2p)!}{p!(p+1)!} C^{n-p} + \sum_{p=2}^{n+1} \frac{(p-1)(2n-p)!}{n!(n+1-p)!} D^p. \quad (1.54)$$

A relação acima está provada no Apêndice A.2.

A relação (1.54) pode ser facilmente checada para casos mais simples. Por exemplo, para $n = 1$, $n = 2$ e $n = 3$, usando diretamente as relações (1.8) e (1.11) temos

$$\begin{aligned} n = 1: \quad DC &= D(D+E) = D^2 + DE = C + D^2 \\ n = 2: \quad DC^2 &= (C+D^2)C = C^2 + D^2(D+E) \\ &= C^2 + D^3 + D(D+E) = C^2 + C + D^3 + D^2 \\ n = 3: \quad DC^3 &= (C^2 + C + D^3 + D^2)C \\ &= C^3 + C^2 + D^2(D+1)(D+E) \\ &= C^3 + C^2 + D^4 + D^3 + D^2(D+2E) \\ &= C^3 + C^2 + D^4 + 2D^3 + 2D(D+E) \\ &= C^3 + C^2 + 2C + 2D^2 + 2D^3 + D^4 \end{aligned}$$

ou usando a relação (1.54) obtemos

$$\begin{aligned} n = 1: \quad DC &= \sum_{p=0}^0 \frac{(2p)!}{p!(p+1)!} C^{1-p} + \sum_{p=2}^2 (p-1)D^p = C + D^2 \\ n = 2: \quad DC^2 &= \sum_{p=0}^1 \frac{(2p)!}{p!(p+1)!} C^{2-p} + \sum_{p=2}^3 \frac{(p-1)(4-p)}{2} D^p = C^2 + C + D^2 + D^3 \\ n = 3: \quad DC^3 &= \sum_{p=0}^2 \frac{(2p)!}{p!(p+1)!} C^{3-p} + \sum_{p=2}^4 \frac{(p-1)(6-p)(5-p)}{3!} D^p \\ &= C^3 + C^2 + 2C + 2D^2 + 2D^3 + D^4 \end{aligned}$$

que, como esperávamos, são exatamente iguais aos valores obtidos usando diretamente as relações (1.8) e (1.11). Podemos substituir a expressão (1.54) na expressão (1.17) para $\langle \tau_i \rangle_N$ para obter para $i \leq N-1$

$$\begin{aligned} \langle \tau_i \rangle_N &= \sum_{p=0}^{n-1} \frac{(2p)!}{p!(p+1)!} \frac{\langle W|C^{i-1}C^{N-i-p}|V \rangle}{\langle W|C^N|V \rangle} + \sum_{p=2}^{n+1} \frac{(p-1)(2n-p)!}{n!(n+1-p)!} \frac{\langle W|C^{i-1}D^p|V \rangle}{\langle W|C^N|V \rangle} \\ &= \sum_{p=0}^{n-1} \frac{(2p)!}{p!(p+1)!} \frac{\langle W|C^{N-1-p}|V \rangle}{\langle W|C^N|V \rangle} + \frac{\langle W|C^{i-1}|V \rangle}{\langle W|C^N|V \rangle} \sum_{p=2}^{n+1} \frac{(p-1)(2n-p)!}{n!(n+1-p)!} \beta^{-p} \quad (1.55) \end{aligned}$$

com $n = N-i$. O caso $i = N$ deve ser tratado separadamente, pois neste caso $n = N-i = 0$ e a expressão (1.54) só vale para $n \geq 1$, mas de (1.17) temos

$$\langle \tau_N \rangle_N = \frac{\langle W|C^{N-1}D|V \rangle}{\langle W|C^N|V \rangle} = \frac{1}{\beta} \frac{\langle W|C^{N-1}|V \rangle}{\langle W|C^N|V \rangle}. \quad (1.56)$$

Dessa forma (1.55) juntamente com (1.53) dão expressões exatas para o perfil de densidade para N arbitrário e valores quaisquer de α e β . A relação (1.54) pode também ser usada para expressar funções correlação de segunda ordem $\langle \tau_i \tau_j \rangle_N$ para $1 \leq i < j \leq N-1$ em termos das funções correlação de ordem um $\langle \tau_i \rangle_N$. Para tanto vamos substituir DC^{N-j} em (1.19) usando (1.54) com $n = N-j$ para obter

$$\begin{aligned} \langle \tau_i \tau_j \rangle_N &= \frac{\langle W | C^{i-1} DC^{j-i-1} DC^{N-j} | V \rangle}{\langle W | C^N | V \rangle} \\ &= \sum_{p=0}^{n-1} \frac{(2p)!}{p!(p+1)!} \frac{\langle W | C^{i-1} DC^{N-i-1-p} | V \rangle}{\langle W | C^N | V \rangle} \\ &\quad + \sum_{p=2}^{n+1} \frac{(p-1)(2n-p)!}{n!(n+1-p)!} \frac{\langle W | C^{i-1} DC^{j-i-1} | V \rangle}{\beta^p \langle W | C^N | V \rangle} \end{aligned} \quad (1.57)$$

Da relação (1.17) podemos escrever $\langle W | C^{i-1} DC^{n-i} | V \rangle = \langle \tau_i \rangle_n \langle W | C^n | V \rangle$ e daí obter

$$\begin{aligned} \text{para } n = N-1-p : \quad & \langle W | C^{i-1} DC^{N-i-1-p} | V \rangle = \langle \tau_i \rangle_{N-1-p} \langle W | C^{N-1-p} | V \rangle \\ \text{para } n = j-1 : \quad & \langle W | C^{i-1} DC^{j-i-1} | V \rangle = \langle \tau_i \rangle_{j-1} \langle W | C^{j-1} | V \rangle \end{aligned}$$

Aplicando as duas igualdades acima em (1.57) obtemos a expressão para $\langle \tau_i \tau_j \rangle_N$ em termos de funções correlação de primeira ordem

$$\begin{aligned} \langle \tau_i \tau_j \rangle_N &= \sum_{p=0}^{n-1} \frac{(2p)!}{p!(p+1)!} \langle \tau_i \rangle_{N-1-p} \frac{\langle W | C^{N-1-p} | V \rangle}{\langle W | C^N | V \rangle} \\ &\quad + \langle \tau_i \rangle_{j-1} \frac{\langle W | C^{j-1} | V \rangle}{\langle W | C^N | V \rangle} \sum_{p=2}^{n+1} \frac{(p-1)(2n-p)!}{n!(n+1-p)!} \beta^{-p} \end{aligned} \quad (1.58)$$

com $n = N-j$. Podemos usar o mesmo esquema para obter qualquer função correlação de ordem maior.

Nesta seção apresentamos os principais resultados obtidos com a técnica matricial e mostramos que essa técnica dá expressões exatas para todas as funções correlação para N , α e β arbitrários. As seções seguintes são dedicadas a encontrar os limites desses resultados quando $N \rightarrow \infty$, o que permite derivar o diagrama de fase do modelo.

1.5 As Formas Assintóticas de $\langle W|C^N|V \rangle$

É útil termos à nossa disposição formas assintóticas para $\langle W|C^N|V \rangle$ quando N é grande. Para tal precisamos calcular a soma $R_n(x)$ definida por

$$R_n(x) = \sum_{p=2}^{n+1} \frac{(p-1)(2n-p)!}{n!(n+1-p)!} x^p \quad (1.59)$$

relevante porque (1.53) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \langle W|C^n|V \rangle &= \sum_{p=2}^{n+1} \frac{(p-1)(2n-p)!}{n!(n+1-p)!} \frac{(1/\beta)^p - (1/\alpha)^p}{1/\beta - 1/\alpha} \\ &= \frac{R_n(1/\beta) - R_n(1/\alpha)}{1/\beta - 1/\alpha} \end{aligned} \quad (1.60)$$

onde trocamos $p \rightarrow p-1$ em (1.53) e depois substituímos a definição (1.59).

Como está provado no Apêndice B, as formas assintóticas de $R_n(1/\beta)$ são:

$$R_n(1/\beta) \simeq \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}(2\beta-1)^2} \frac{4^n}{n^{3/2}} & \text{para } \beta > 1/2 \\ 2 \frac{4^n}{n^{1/2}} & \text{para } \beta = 1/2 \\ (1-2\beta) \left(\frac{1}{\beta(1-\beta)} \right)^{n+1} & \text{para } \beta < 1/2. \end{cases} \quad (1.61)$$

O próximo passo é aplicar as expressões acima em (1.60) para determinar as seguintes formas assintóticas de $\langle W|C^N|V \rangle$ para N grande.

(a) Para $\frac{1}{2} < \alpha < \beta$

$$\begin{aligned} \langle W|C^N|V \rangle &= \frac{4^N}{\sqrt{\pi}N^{3/2}} \left[\frac{\frac{1}{(2\alpha-1)^2} - \frac{1}{(2\beta-1)^2}}{\frac{1}{\beta} - \frac{1}{\alpha}} \right] \\ &= \frac{4^N}{\sqrt{\pi}N^{3/2}} \frac{\alpha\beta}{\beta - \alpha} \left[\frac{1}{(2\alpha-1)^2} - \frac{1}{(2\beta-1)^2} \right]. \end{aligned} \quad (1.62)$$

(a') Para $\frac{1}{2} < \alpha = \beta$ devemos calcular o limite de (1.62) quando $\beta \rightarrow \alpha$ usando a regra de l'Hôpital, pois é uma indeterminação. Vamos calcular o seguinte limite

$$\lim_{\beta \rightarrow \alpha} \left[\frac{\frac{1}{(2\alpha-1)^2} - \frac{1}{(2\beta-1)^2}}{\beta - \alpha} \right] = \lim_{\beta \rightarrow \alpha} \left[\frac{4}{(2\beta-1)^3} \right] = \frac{4}{(2\alpha-1)^3}$$

que aplicado em (1.62) dá

$$\langle W|C^N|V \rangle = \frac{\alpha^2}{\sqrt{\pi}(2\alpha - 1)^3} \frac{4^{N+1}}{N^{3/2}}. \quad (1.63)$$

(b) Para $\alpha = \frac{1}{2} < \beta$

$$\begin{aligned} \langle W|C^N|V \rangle &= \left(\frac{1}{\beta} - 2 \right)^{-1} \left[\frac{4^N}{\sqrt{\pi}N^{3/2}} \frac{1}{(2\beta - 1)^2} - 2 \frac{4^N}{N^{1/2}} \right] \\ &= \frac{2\beta}{(2\beta - 1)} \frac{4^N}{N^{1/2}} \end{aligned} \quad (1.64)$$

onde desprezamos o termo proporcional a $N^{-3/2}$ que é muito menor que o termo proporcional a $N^{-1/2}$ para N grande.

(b') Para $\alpha = \beta = \frac{1}{2}$ temos $\alpha + \beta = 1$ e, da discussão após a equação (1.45), podemos escolher $C = 1/\alpha + 1/\beta = 4$ e, portanto, $C^N = 4^N$ e assim temos

$$\langle W|C^N|V \rangle = 4^N. \quad (1.65)$$

(c) Para $\alpha < \frac{1}{2}$ e $\alpha < \beta$ temos

$$\begin{aligned} \langle W|C^N|V \rangle &= \frac{\alpha\beta}{\beta - \alpha} R_N(1/\alpha) \\ &= \frac{\beta(1 - 2\alpha)}{(\beta - \alpha)(1 - \alpha)} \frac{1}{\alpha^N(1 - \alpha)^N} \end{aligned} \quad (1.66)$$

Note que desprezamos o termo $R_N(1/\beta)$, pois, de acordo com (1.61),

$$R_N(1/\alpha) = (1 - 2\alpha)[\alpha(1 - \alpha)]^{-n-1} \gg R_N(1/\beta)$$

independente de β ser maior, menor ou igual a $\frac{1}{2}$. Para $\beta \geq 1/2$, isso é fácil de ver, uma vez que $R_N(1/\beta)$ é proporcional a $N^{-3/2}$ e $N^{-1/2}$. Para $\beta < 1/2$, a aproximação acima também vale, uma vez que é fácil mostrar graficamente que $\alpha(1 - \alpha) < \beta(1 - \beta)$.

(d) Para $\alpha = \beta < \frac{1}{2}$ temos que calcular o seguinte limite

$$\begin{aligned} \langle W|C^N|V \rangle &= \lim_{\beta \rightarrow \alpha} \alpha \beta \frac{(1-2\beta) \left(\frac{1}{\beta(1-\beta)}\right)^{N+1} + (1-2\alpha) \left(\frac{1}{\alpha(1-\alpha)}\right)^{N+1}}{\alpha - \beta} \\ &= \alpha^2 \lim_{\beta \rightarrow \alpha} \left[2 \left(\frac{1}{\beta(1-\beta)}\right)^{N+1} + \right. \\ &\quad \left. + (1-2\beta)(N+1) \left(\frac{1}{\beta(1-\beta)}\right)^{N+2} (1-2\beta) \right]. \end{aligned}$$

Desprezando o primeiro termo entre colchetes, pois o segundo é proporcional a $N+1 \simeq N$, temos

$$\langle W|C^N|V \rangle = \frac{(1-2\alpha)^2}{(1-\alpha)^2} \frac{N}{\alpha^N(1-\alpha)^N}. \quad (1.67)$$

Note que, como (1.60) é simétrica em α e β (simetria partícula-buraco), os casos onde $\beta < \alpha$ podem ser obtidos dos casos onde $\beta > \alpha$ trocando-se $\alpha \leftrightarrow \beta$.

1.6 A Corrente e o Diagrama de Fase

Na seção 1.1 nós vimos que, no estado estacionário, a corrente no sítio i é simplesmente $J = \langle \tau_i(1 - \tau_{i+1}) \rangle$, pois durante um intervalo de tempo dt , a probabilidade de que uma partícula salte do sítio i para o sítio $i+1$ é $\tau_i(1 - \tau_{i+1})dt$. Portanto, usando (1.17) e (1.19), J é dado por

$$\begin{aligned} J &= \frac{\langle W|C^{i-1}DC^{N-i}|V \rangle - \langle W|C^{i-1}D^2C^{N-i-1}|V \rangle}{\langle W|C^N|V \rangle} \\ &= \frac{\langle W|C^{i-1}D(C-D)C^{N-i-1}|V \rangle}{\langle W|C^N|V \rangle} = \frac{\langle W|C^{N-1}|V \rangle}{\langle W|C^N|V \rangle} \end{aligned} \quad (1.68)$$

onde usamos $C-D = E$ e $DE = C$. Note que esta expressão é independente de i , com é esperado no estado estacionário.

Das formas assintóticas de $\langle W|C^N|V \rangle$, obtida na seção 1.5, é fácil ver que no limite $N \rightarrow \infty$

(i) para $\alpha \geq \frac{1}{2}$ e $\beta \geq \frac{1}{2}$

$$J = \frac{1}{4} \quad (1.69)$$

(ii) para $\alpha < \frac{1}{2}$ e $\alpha < \beta$

$$J = \alpha(1 - \alpha) \quad (1.70)$$

(iii) para $\beta < \frac{1}{2}$ e $\beta < \alpha$

$$J = \beta(1 - \beta). \quad (1.71)$$

Vamos provar as equações acima, aplicando uma a uma as equações (1.62)-(1.67) em (1.68). Se aplicarmos (1.62) em (1.68) temos

$$J = \frac{4^{N-1}}{(N-1)^{3/2}} \frac{N^{3/2}}{4^N} = \frac{1}{4}$$

onde cancelamos as partes que não dependem de N e fizemos $N/(N-1) \simeq 1$ o que é verdade no limite $N \rightarrow \infty$. É fácil verificar que obtemos o mesmo valor de J substituindo (1.63), (1.64) e (1.65) em (1.68), pois a dependência em N dessas expressões é praticamente a mesma. Note que o valor de J obtido é independente de α e β , isto implica que os casos simétricos (troca $\alpha \leftrightarrow \beta$) também dão os mesmos resultados. Assim a equação (1.69) vale para todo $\alpha \geq \frac{1}{2}$ e $\beta \geq \frac{1}{2}$. Usando a expressão (1.66) em (1.68) obtemos

$$J = \frac{\alpha^N(1-\alpha)^N}{\alpha^{N-1}(1-\alpha)^{N-1}} = \alpha(1-\alpha)$$

para $\alpha < \frac{1}{2}$ e $\alpha < \beta$ o que corresponde a equação (1.70). Como já discutido, trocando-se $\alpha \leftrightarrow \beta$ obtemos o resultado para $\beta < \frac{1}{2}$ e $\beta < \alpha$ que é $J = \beta(1 - \beta)$. Com isso provamos a última equação que restava. Note que se substituirmos (1.67) em (1.68) obtemos

$$J = \frac{\alpha^N(1-\alpha)^N}{\alpha^{N-1}(1-\alpha)^{N-1}} = \alpha(1-\alpha) = \beta(1-\beta)$$

pois, nesse caso, $\alpha = \beta$. Isto quer dizer que (1.70) e (1.71) também valem para esse caso.

Com isso podemos concluir que o diagrama de fase é composto por três fases (ver figura 1.1): $\alpha > \frac{1}{2}, \beta > \frac{1}{2}$; $\alpha < \frac{1}{2}, \alpha < \beta$; $\beta < \frac{1}{2}, \beta < \alpha$. O mesmo diagrama de fase foi obtido por Andjel *et al.* [27] e é corretamente dado pela aproximação de campo médio [1, 18]. A equação (1.69) corresponde a fase de corrente máxima enquanto que (1.70) e (1.71) correspondem, respectivamente, as fases de baixa e alta densidade como vamos ver na próxima seção.

1.7 A Densidade $\langle \tau_i \rangle_N$ Longe das Fronteiras

Da relação (1.55) e das formas assintóticas (1.62)-(1.67) de $\langle W|C^N|V \rangle$, é possível obter a forma assintótica de $\langle \tau_i \rangle_N$ no limite $N \rightarrow \infty$, com $i = Nx$ e $0 < x < 1$ (isto é, para N grande e i no meio do sistema, bem longe das extremidades). Em todos os casos (1.62)-(1.67), vimos que

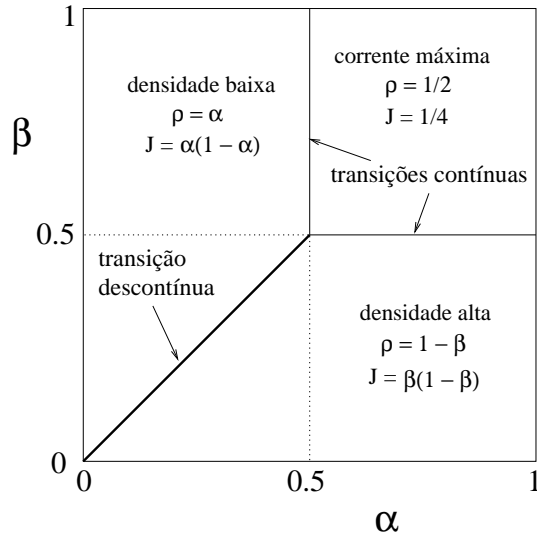


Figura 1.1: Diagrama de fase do modelo. A região $\alpha > \frac{1}{2}, \beta > \frac{1}{2}$ é a fase de corrente máxima, enquanto que $\alpha < \frac{1}{2}, \alpha < \beta$ é a fase de densidade baixa e $\beta < \frac{1}{2}, \beta < \alpha$ é a fase de densidade alta. A linha $\alpha = \beta < \frac{1}{2}$ é uma linha de transição de primeira ordem.

$\langle W|C^N|V \rangle$ tem o seguinte comportamento assintótico para N grande:

$$\langle W|C^N|V \rangle = AN^z \lambda^N \quad (1.72)$$

onde A , z e λ dependem de α e β como em (1.62)-(1.67). Aplicando a expressão genérica acima em (1.55) obtemos

$$\begin{aligned} \langle \tau_i \rangle_N &\simeq \sum_{p=0}^{n-1} \frac{(2p)!}{p!(p+1)!} \left(\frac{N-1-p}{N} \right)^z \frac{1}{\lambda^{p+1}} \\ &+ \left(\frac{i-1}{N} \right)^z \frac{1}{\lambda^{N-i+1}} \sum_{p=2}^{n+1} \frac{(p-1)(2n-p)!}{n!(n+1-p)!} \beta^{-p} \end{aligned} \quad (1.73)$$

onde $n = N - i$. Note a seguinte aproximação

$$\left(\frac{N-1-p}{N} \right)^z \frac{1}{\lambda^{p+1}} \simeq \begin{cases} \left(\frac{N-1}{N} \right)^z \frac{1}{\lambda^{p+1}} \simeq \frac{1}{\lambda^{p+1}} & \text{se } \frac{p}{n} \rightarrow 0 \\ \left(\frac{N-1-n}{N} \right)^z \frac{1}{\lambda^{p+1}} \simeq \frac{x^z}{\lambda^{n+1}} \simeq 0 & \text{se } \frac{p}{n} \rightarrow 1 \end{cases} \quad (1.74)$$

ou seja, o termo dominante do primeiro somatório é $p = 0$, pois o fator $\frac{1}{\lambda^{p+1}}$ diminui quando p aumenta, uma vez que em todos os casos (1.62)-(1.67) $\lambda > 1$. No segundo termo de (1.73) podemos fazer a aproximação $[(i-1)/N]^z \simeq (i/N)^z = x^z$ já que $i \gg 1$ (longe das fronteiras) e fazer $\lambda^{N-i+1} = \lambda^{n+1}$ usando o fato de $n = N - i$. Aplicando essas aproximações em (1.73)

obtemos

$$\langle \tau_i \rangle_N \simeq \sum_{p=0}^{n-1} \frac{(2p)!}{p!(p+1)!} \frac{1}{\lambda^{p+1}} + \frac{x^z}{\lambda^{n+1}} \sum_{p=2}^{n+1} \frac{(p-1)(2n-p)!}{n!(n+1-p)!} \beta^{-p} \quad (1.75)$$

onde, como sempre, $n = N - i$. Para n grande e $\lambda \geq 4$, o que é verdade para todos os casos, o primeiro termo na equação (1.75) converge para $(1 - \sqrt{1 - 4/\lambda})/2$. Vamos mostrar isso expandindo $\sqrt{1 - 4/\lambda}$ para dar

$$\begin{aligned} (1 - 4/\lambda)^{1/2} &= 1 - \frac{1}{2}(4/\lambda) - \frac{1}{2^2} \frac{(4/\lambda)^2}{2} - \frac{3}{2^3} \frac{(4/\lambda)^3}{3!} - \frac{5 \cdot 3}{2^4} \frac{(4/\lambda)^4}{4!} - \dots \\ &= 1 - \sum_{p=1}^{\infty} \frac{(2p-3)!!}{2^p p!} \left(\frac{4}{\lambda}\right)^p \\ &= 1 - 2 \sum_{p=0}^{\infty} \frac{2^p (2p-1)!!}{(p+1)!} \frac{1}{\lambda^{p+1}} \\ &= 1 - 2 \sum_{p=0}^{\infty} \frac{2^p p! (2p-1)!!}{p!(p+1)!} \frac{1}{\lambda^{p+1}} \\ &= 1 - 2 \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(2p)!}{p!(p+1)!} \frac{1}{\lambda^{p+1}} \end{aligned} \quad (1.76)$$

onde definimos $(2p-3)!! \equiv (2p-3)(2p-5)(2p-7)\dots 7 \cdot 5 \cdot 3 \cdot 1$. Note que usamos a igualdade $2^p p! (2p-1)!! = (2p)!$ que pode ser facilmente provada abrindo a expressão $2^p p! (2p-1)!!$. Agora basta inverter a equação acima para ver que o somatório converge para $(1 - \sqrt{1 - 4/\lambda})/2$. Usando essa expressão para o primeiro termo da equação (1.75) e as formas assintóticas (1.61) obtemos o seguinte:

(i) Para $\alpha \geq \frac{1}{2}$ e $\beta \geq \frac{1}{2}$ temos $\lambda = 4$ (ver (1.62)-(1.65)) e, como o segundo termo é proporcional a $n^{-3/2}$ ou a $n^{-1/2}$ (ver (1.61)) e n é grande, o primeiro termo domina sobre o segundo, o que resulta em

$$\langle \tau_i \rangle_N \simeq \frac{1}{2}. \quad (1.77)$$

(ii) Para $\alpha < \frac{1}{2}$ e $\alpha < \beta$ temos $1/\lambda = \alpha(1-\alpha)$ e $z = 0$, o primeiro termo ainda domina, então

$$\langle \tau_i \rangle_N \simeq \frac{1 - \sqrt{1 - 4\alpha(1-\alpha)}}{2} = \frac{1 - \sqrt{(1-2\alpha)^2}}{2} = \alpha \quad (1.78)$$

note que, como $\alpha < \frac{1}{2}$, fizemos $\sqrt{(1-2\alpha)^2} = 1 - 2\alpha$. Podemos ver que o primeiro termo em (1.75) domina (independente se β é maior, menor ou igual a $\frac{1}{2}$) pois o segundo termo é proporcional a $n^{-3/2}$ quando $\beta > \frac{1}{2}$, a $n^{-1/2}$ quando $\beta = \frac{1}{2}$ e a $(\alpha(1-\alpha)/\beta(1-\beta))^{n+1}$ quando $\beta < \frac{1}{2}$ que tendem a zero para n grande (pois $\alpha(1-\alpha) < \beta(1-\beta)$).

(iii) Para $\beta < \frac{1}{2}$ e $\beta < \alpha$ temos $1/\lambda = \beta(1-\beta)$ e $z = 0$, nesse caso ambos os termos em

(1.75) contribuem

$$\begin{aligned} \langle \tau_i \rangle_N &\simeq \frac{1 - \sqrt{1 - 4\beta(1 - \beta)}}{2} + x^z(1 - 2\beta) \left(\frac{1}{\beta(1 - \beta)} \right)^{n+1} \frac{1}{\lambda^{n+1}} \\ &= \beta + 1 - 2\beta = 1 - \beta. \end{aligned} \quad (1.79)$$

(iv) Para $\alpha = \beta < \frac{1}{2}$ temos $1/\lambda = \alpha(1 - \alpha) = \beta(1 - \beta)$ e $z = 1$ que aplicado em (1.75) dá

$$\langle \tau_i \rangle_N \simeq \frac{1 - \sqrt{1 - 4\beta(1 - \beta)}}{2} + x^z(1 - 2\beta) \left(\frac{1}{\beta(1 - \beta)} \right)^{n+1} \frac{1}{\lambda^{n+1}} = \beta + x(1 - 2\beta). \quad (1.80)$$

Assim, em qualquer lugar no diagrama de fase o perfil é constante em relação a i longe das fronteiras exceto ao longo da linha de transição de primeira ordem $\alpha = \beta < \frac{1}{2}$ onde o perfil é linear (equação (1.80)). Na fase de corrente máxima, a densidade é $\frac{1}{2}$ (equação (1.77)). A região $\alpha < \frac{1}{2}$ e $\alpha < \beta$ corresponde a fase de baixa densidade (ver equação (1.78) e notar que taxa de inserção é menor que a de remoção) enquanto que a região $\beta < \frac{1}{2}$ e $\beta < \alpha$ corresponde a fase de alta densidade (ver equação (1.79) e notar que taxa de inserção é maior que a de remoção). Há um salto na densidade quando se atravessa a linha de transição de primeira ordem $\alpha = \beta < \frac{1}{2}$.

O resultado que para $\alpha = \beta < \frac{1}{2}$ o perfil é linear é devido ao fato que, ao longo dessa linha, há uma superposição de estados onde o choque entre uma região do lado esquerdo de densidade α e uma região do lado direito de densidade $1 - \beta$ acontece em posições arbitrárias [27].

2 *As Equações de Langevin e de Fokker-Planck*

O método de Langevin é usado com o propósito de investigar os efeitos de flutuações em sistemas macroscópicos. As flutuações são introduzidas por meio da adição de termos aleatórios (conhecidos como ruído) à equação de movimento que descreve o sistema macroscópico em questão. Relacionadas com o método de Langevin e, geralmente, superiores a esse, as técnicas baseadas na equação de Fokker-Planck são uma ferramenta poderosa em estudos sobre os efeitos das flutuações em problemas que envolvem ruído, por exemplo, circuitos elétricos. Nesse capítulo apresentamos uma discussão básica da física e dos métodos envolvidos nas técnicas baseadas na equação de Langevin e uma breve discussão da equação de Fokker-Planck e suas variantes.

2.1 *A Equação de Langevin*

2.1.1 *Movimento Browniano e a Equação de Langevin*

Antes de expressar analiticamente a equação de Langevin, é útil pensar no fenômeno físico que justifica a introdução de tal equação. Se uma partícula de massa m está imersa em um fluido, uma força de fricção atua na partícula. A expressão mais simples para a força de fricção ou amortecimento é dada pela lei de Stokes

$$F_c = -bv \tag{2.1}$$

onde v é a velocidade da partícula relativa ao fluido e b é uma constante relacionada à intensidade do amortecimento. Na ausência de forças adicionais a equação de movimento da partícula é

$$m\dot{v} + bv = 0 \tag{2.2}$$

ou

$$\dot{v} + \gamma v = 0; \quad \gamma = b/m. \quad (2.3)$$

Dessa forma uma velocidade inicial $v(0)$ decai a zero com um tempo de relaxação $\tau = 1/\gamma$ de acordo com

$$v(t) = v(0)e^{-t/\tau} = v(0)e^{-\gamma t}. \quad (2.4)$$

Note que a equação (2.3) é determinística, ou seja, a velocidade da partícula num tempo posterior é completamente determinada pelo seu valor inicial (equação (2.4)). É importante ressaltar que a equação (2.3) só é válida no limite onde a massa da partícula é tão grande que sua velocidade devida às flutuações térmicas é negligenciável.

Do teorema da equipartição de energia, a energia cinética média da partícula devido às flutuações térmicas é (em uma dimensão)

$$\frac{1}{2}m\langle v^2 \rangle = \frac{1}{2}k_B T, \quad (2.5)$$

onde k_B é a constante de Boltzman e T é a temperatura. Para uma massa m pequena, a velocidade térmica $v_{th} \equiv \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{k_B T/m}$ pode ser observável e, portanto, a velocidade da partícula não pode ser descrita corretamente por (2.2) e pela solução (2.4). Então a equação (2.2) deve ser modificada para dar conta da energia térmica da partícula. A modificação consiste em acrescentar uma força aleatória (ou estocástica) no lado direito da equação (2.2) de modo que, além da força de amortecimento $F_c(t)$, as moléculas do fluido exercem também uma força aleatória $F_a(t)$ na partícula de acordo com

$$F(t) = F_c(t) + F_a(t) = -bv(t) + F_a(t). \quad (2.6)$$

A força aleatória é irregular e imprevisível, mas suas propriedades médias são definidas. A justificativa para a introdução de uma força aleatória é simples. Se fôssemos tratar o problema resolvendo todas as equações de movimento das moléculas do fluido e da partícula imersa a força aleatória não apareceria. Por causa do número grande de moléculas no fluido (da ordem de 10^{23}) não é possível resolver genericamente as equações de movimento. Então, a saída é se preocupar apenas com o movimento da partícula imersa no fluido e introduzir a força $F_a(t)$ para descrever o efeito aleatório dos choques com as moléculas do fluido. Dessa forma, abordamos o problema com uma descrição essencialmente probabilística, isto é, completamente dependente das propriedades estatísticas do ruído.

Inserindo o termo aleatório de (2.6) em (2.2) e dividindo pela massa obtemos a equação de movimento

$$\dot{v} + \gamma v = \Gamma(t). \quad (2.7)$$

A equação acima é chamada de equação diferencial estocástica porque contém a força estocástica $\Gamma(t) = F_a(t)/m$.

Para prosseguirmos, precisamos conhecer as propriedades estocásticas de $\Gamma(t)$. Assumimos que tais propriedades são independentes de v e postulamos, com base em argumentos fisicamente plausíveis, o seguinte:

1. A média de $\Gamma(t)$ deve ser nula

$$\langle \Gamma(t) \rangle = 0, \quad (2.8)$$

porque a equação de movimento da velocidade média $\langle v(t) \rangle$ deve ser dada por (2.2). Ou seja, espera-se que a força aleatória média das moléculas atuando na partícula seja nula. Se a média não fosse nula, teríamos que modificar a parte determinística da força para incluir essa contribuição e subtrair essa parte do ruído.

2. Se multiplicarmos $\Gamma(t)$ em tempo diferentes, assumimos que o valor médio é zero para diferenças de tempo $|t - t'|$ que são maiores que o tempo de duração τ_0 de uma colisão:

$$\langle \Gamma(t)\Gamma(t') \rangle = 0 \quad \text{para} \quad |t - t'| \geq \tau_0. \quad (2.9)$$

Isso parece razoável, uma vez que colisões de diferentes moléculas do fluido com a partícula são aproximadamente independentes. Geralmente, o tempo de duração τ_0 de uma colisão é muito menor do que o tempo de relaxação $\tau = 1/\gamma$ da velocidade da partícula ($\tau = 1/\gamma$ nos dá a ordem de grandeza do tempo de interesse, que é o tempo de observação do movimento da partícula). Portanto, podemos usar o limite $\tau_0 \rightarrow 0$ como uma aproximação razoável e escrever:

$$\langle \Gamma(t)\Gamma(t') \rangle = q\delta(t - t'), \quad (2.10)$$

onde q é uma constante que dá a intensidade do ruído.

Um termo aleatório tendo as propriedades 1 e 2, acima mencionadas, é chamado de força de Langevin e a expressão (2.7) é a equação de Langevin. É importante ressaltar que não é correto chamar (2.7) sem a especificação das propriedades 1 e 2 de equação de Langevin. Note que as propriedades 1 e 2 não determinam completamente o processo estocástico, mas apenas seus dois primeiros momentos. Uma especificação completa é dada assumindo que a variável aleatória $\Gamma(t)$ é distribuída de acordo com a distribuição gaussiana com média zero. Isto significa que,

ver [28], os momentos são dados por

$$\begin{aligned} \langle \Gamma(t_1)\Gamma(t_2)\dots\Gamma(t_{2n-1}) \rangle &= 0 \\ \langle \Gamma(t_1)\Gamma(t_2)\dots\Gamma(t_{2n}) \rangle &= q^n \left[\sum_P \delta(t_{i_1} - t_{i_2})\delta(t_{i_3} - t_{i_4})\dots\delta(t_{i_{2n-1}} - t_{i_{2n}}) \right], \end{aligned} \quad (2.11)$$

onde a soma deve ser realizada sobre todas as $(2n)!/(2^n n!)$ permutações possíveis que levam a diferentes expressões para $\delta(t_{i_1} - t_{i_2})\delta(t_{i_3} - t_{i_4})\dots\delta(t_{i_{2n-1}} - t_{i_{2n}})$. Por exemplo, para $n = 2$ temos

$$\begin{aligned} \langle \Gamma(t_1)\Gamma(t_2)\Gamma(t_3) \rangle &= 0 \\ \langle \Gamma(t_1)\Gamma(t_2)\Gamma(t_3)\Gamma(t_4) \rangle &= q^2 [\delta(t_1 - t_2)\delta(t_3 - t_4) + \delta(t_1 - t_3)\delta(t_2 - t_4) \\ &\quad + \delta(t_1 - t_4)\delta(t_2 - t_3)]. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Uma vez que o processo estocástico $\Gamma(t)$ foi completamente especificado, a solução para (2.7) com a condição inicial $v(0) = v_0$ pode ser completamente determinada.

No estudo de processos estocásticos, uma grandeza de interesse é a intensidade espectral de um processo estocástico cuja definição é dada pela transformada de Fourier da função de correlação, ou seja

$$S(\omega) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega\tau} \langle \xi(\tau)\xi^*(0) \rangle d\tau, \quad (2.13)$$

onde $\xi(\tau)$ é uma variável estocástica que pode ser complexa. A intensidade espectral da força de Langevin é independente da frequência ω :

$$S(\omega) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega\tau} q\delta(\tau) d\tau = 2q. \quad (2.14)$$

Por essa razão, a força de Langevin, com uma função de correlação delta de Dirac, é chamada de ruído branco, uma vez que todas as frequências estão presentes com a mesma intensidade, o que caracteriza a luz branca. Em geral, a intensidade espectral depende de ω e, nesse caso, o ruído é chamado de ruído colorido.

2.1.2 Solução da Equação de Langevin

A equação de Langevin (2.7) define $v(t)$ como um processo estocástico quando uma condição inicial é fornecida. Vamos resolver a equação com a condição inicial de que no tempo $t = 0$ a variável estocástica $v(t)$ tem o valor bem definido $v(0) = v_0$. Com essa condição inicial

a solução de (2.7) se escreve

$$v(t) = v_0 e^{-\gamma t} + \int_0^t e^{-\gamma(t-t')} \Gamma(t') dt'. \quad (2.15)$$

A solução acima corresponde a soma da solução homogênea $v_H(t) = v_0 e^{-\gamma t}$ com a solução particular $v_P(t) = \int_0^t e^{-\gamma(t-t')} \Gamma(t') dt'$. A solução homogênea é facilmente encontrada (solução de (2.3)). A solução particular é obtida pelo método de variação de constantes. Primeiro supomos uma solução da forma $v_P(t) = c(t) e^{-\gamma t}$ (que é a solução homogênea com a constante v_0 substituída pelo fator dependente do tempo $c(t)$). Essa solução aplicada em (2.7) resulta

$$\dot{c}(t) = e^{\gamma t} \Gamma(t). \quad (2.16)$$

Integrando a equação acima de 0 a t obtemos $c(t) = \int_0^t e^{\gamma t'} \Gamma(t') dt'$ que a solução particular de (2.7).

Vamos fazer a média da equação acima sobre um ensemble de partículas brownianas todas tendo o mesmo valor v_0 para a velocidade inicial. Dessa forma

$$\langle v(t) \rangle = v_0 e^{-\gamma(t)}, \quad (2.17)$$

onde usamos a propriedade de (2.8) de $\Gamma(t)$. Usando a propriedade (2.10) obtemos a função correlação da velocidade:

$$\langle v(t_1) v(t_2) \rangle = v_0^2 e^{-\gamma(t_1+t_2)} + \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} e^{-\gamma(t_1+t_2-t'_1-t'_2)} q \delta(t'_1 - t'_2) dt'_1 dt'_2. \quad (2.18)$$

Para calcular a integral dupla, primeiro integramos em t'_2 . E a integral sobre t'_1 vai de 0 a $\min(t_1, t_2)$. Isso ocorre porque a função delta de Dirac restringe o integrando à linha $t'_1 = t'_2$ (ver Figura 2.1). Dessa forma, temos

$$\begin{aligned} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} e^{-\gamma(t_1+t_2-t'_1-t'_2)} q \delta(t'_1 - t'_2) dt'_1 dt'_2 &= q \int_0^{\min(t_1, t_2)} e^{-\gamma(t_1+t_2-2t'_1)} dt'_1 \\ &= \frac{q}{2\gamma} (e^{-\gamma(t_1+t_2-2\min(t_1, t_2))} - e^{-\gamma(t_1+t_2)}) \\ &= \frac{q}{2\gamma} (e^{-\gamma|t_1-t_2|} - e^{-\gamma(t_1+t_2)}). \end{aligned}$$

Note que se $t_1 > t_2$ o argumento da primeira exponencial dá $-\gamma(t_1 - t_2) < 0$ e, caso contrário, $-\gamma(t_2 - t_1) < 0$; isso justifica o uso da função módulo.

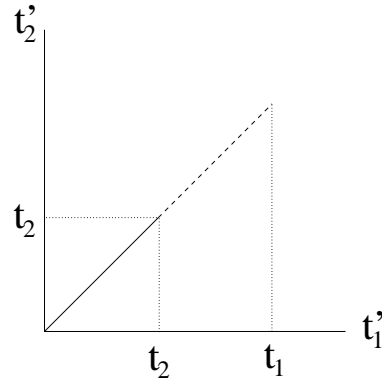


Figura 2.1: Linha de integração de (2.18) para para $t_2 < t_1$. O integrando só é diferente de zero sobre a linha $t'_2 = t'_1 < t_2$

Assim, obtemos a função correlação da velocidade

$$\langle v(t_1)v(t_2) \rangle = (v_0^2 - \frac{q}{2\gamma})e^{-\gamma(t_1+t_2)} + \frac{q}{2\gamma}e^{-\gamma|t_1-t_2|}. \quad (2.19)$$

Para $t_1 \gg 1/\gamma$ e $t_2 \gg 1/\gamma$, o regime estacionário, a função correlação da velocidade é independente da condição inicial v_0 e é uma função apenas da diferença de tempo $t_1 - t_2$, a saber

$$\langle v(t_1)v(t_2) \rangle = \frac{q}{2\gamma}e^{-\gamma|t_1-t_2|}. \quad (2.20)$$

Portanto, no estado estacionário a energia média das partículas brownianas é dada por

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2}m\langle [v(t)]^2 \rangle = \frac{1}{2}m\frac{q}{2\gamma}. \quad (2.21)$$

Agora podemos determinar q de modo que a energia média seja dada pelo teorema da equipartição da energia (ver equação (2.5)). Desse modo, obtemos para a constante q o valor

$$q = \frac{2\gamma k_B T}{m} \quad (2.22)$$

Esta equação relaciona q , o tamanho do termo de flutuação, à constante γ . É a forma mais simples do teorema da flutuação-dissipação. O cenário físico é bastante interessante: os choques da partícula com as moléculas do fluido dão impulsos aleatórios que tendem a mudar v , enquanto o termo de amortecimento (também devido à presença do fluido) tenta diminuir a velocidade para zero. O balanço entre essas duas tendências opostas é a distribuição de equilíbrio.

2.1.3 Deslocamento Quadrático Médio

Para uma partícula browniana é difícil medir a função correlação da velocidade. Mas, por exemplo, num microscópio, é fácil medir o deslocamento quadrático médio produzido pela flutuação da velocidade. Se assumirmos que a partícula parte de $x = x_0$ em $t = 0$ com uma velocidade $v = v_0$, o valor médio do quadrado do seu deslocamento no tempo t é dado por

$$\begin{aligned} \langle (x(t) - x_0)^2 \rangle &= \left\langle \left[\int_0^t v(t_1) dt_1 \right]^2 \right\rangle = \left\langle \int_0^t v(t_1) dt_1 \int_0^t v(t_2) dt_2 \right\rangle \\ &= \int_0^t \int_0^t \langle v(t_1)v(t_2) \rangle dt_1 dt_2, \end{aligned} \quad (2.23)$$

onde $\langle v(t_1)v(t_2) \rangle$ é a função correlação da velocidade. Para prosseguir, precisamos resolver as seguintes integrais:

$$\int_0^t \int_0^t e^{-\gamma(t_1+t_2)} dt_1 dt_2 = \left[\int_0^t e^{-\gamma t_1} dt_1 \right]^2 = \left[\frac{1 - e^{-\gamma t}}{\gamma} \right]^2, \quad (2.24)$$

que sai por integração direta, e

$$\begin{aligned} \int_0^t \int_0^t e^{-\gamma|t_1-t_2|} dt_1 dt_2 &= \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 e^{-\gamma(t_2-t_1)} + \int_0^t dt_2 \int_{t_2}^t dt_1 e^{-\gamma(t_1-t_2)} \\ &= \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 e^{-\gamma(t_2-t_1)} + \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 e^{-\gamma(t_1-t_2)} \\ &= 2 \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 e^{-\gamma(t_2-t_1)} = \frac{2}{\gamma} \int_0^t dt_2 [1 - e^{-\gamma t_2}] \\ &= \frac{2}{\gamma} t - \frac{2}{\gamma^2} (1 - e^{-\gamma t}). \end{aligned} \quad (2.25)$$

No cálculo da segunda integral é preciso primeiro separar a integral em duas partes, uma para a região onde $t_1 < t_2$ e outra para a região onde $t_1 > t_2$. Depois deve-se trocar a ordem de integração da segunda parte, ou seja, integrar primeiro em t_1 e depois em t_2 . O último passo é notar que se trocarmos $t_1 \longleftrightarrow t_2$ na segunda integral ela fica igual a primeira.

Com os resultados (2.24) e (2.25) obtemos o deslocamento quadrático médio para a partícula browniana

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle = \left(v_0^2 - \frac{q}{2\gamma} \right) \frac{(1 - e^{-\gamma t})^2}{\gamma^2} + \frac{q}{\gamma^2} t - \frac{q}{\gamma^3} (1 - e^{-\gamma t}). \quad (2.26)$$

Para tempos longos (regime estacionário) o termo dominante é

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle = \frac{q}{\gamma^2} t = 2Dt \quad (2.27)$$

com

$$D = \frac{q}{2\gamma^2} = \frac{k_B T}{m\gamma}. \quad (2.28)$$

A última relação é conhecido como relação de Einstein-Smoluchowski para a constante de difusão D [29].

2.1.4 Integração Numérica da Equação de Langevin

Podemos resolver a equação de Langevin numericamente, um procedimento geralmente chamado de dinâmica browniana. A principal diferença, em relação à integração numérica de equações diferenciais usuais, é que, em equações diferenciais estocásticas, devemos gerar o termo aleatório no computador (como a força de Langevin $\Gamma(t)$ na equação (2.7)). Com o termo aleatório simulado, a única coisa que nos resta é integrar a equação de movimento e fazer médias sobre o resultados para um número grande de realizações.

Antes de apresentar o algoritmo para a integração numérica da equação de Langevin, vamos discutir o processo estocástico de Wiener e a integração numérica de equações estocásticas com ruídos aditivos.

Ruído branco e o processo de Wiener

O processo de Wiener, de grande importância em cálculo estocástico, está diretamente associado ao ruído branco por meio da sua definição

$$W(t) = \int_0^t \xi(t') dt', \quad (2.29)$$

onde $\xi(t)$ é proporcional à força de Langevin, ou melhor

$$\begin{aligned} \langle \xi(t) \rangle &= 0 \\ \langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle &= \delta(t_2 - t_1). \end{aligned} \quad (2.30)$$

Note que o ruído branco não é necessariamente gaussiano. As seguintes propriedades de $W(t)$ seguem diretamente da sua definição:

1. $\langle W(t) \rangle = 0$, que segue de $\langle \xi(t) \rangle = 0$;

2. $\langle W(t_1)W(t_2) \rangle = \min(t_1, t_2)$, que segue da definição da função correlação:

$$\begin{aligned} \langle W(t_1)W(t_2) \rangle &= \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} dt'_1 dt'_2 \langle \xi(t'_1)\xi(t'_2) \rangle = \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} dt'_1 dt'_2 \delta(t_2 - t_1) \\ &= \int_0^{\min\{t_1, t_2\}} dt'_1 = \min\{t_1, t_2\} \end{aligned}$$

onde, assim como no cálculo da função correlação da velocidade (seção 2.1.2), a função delta limita a integral à linha $t'_1 = t'_2$.

3. $W(t)$ é um processo estocástico markoviano (soma de processos estocásticos cujo tempo de correlação é nulo) e gaussiano (segue do teorema do limite central, uma vez que é a soma de variáveis aleatórias independentes cujas variâncias são finitas) [30]. Da propriedade 2 vemos que a variância de $W(t)$ é $\sigma^2 = t$, portanto, a sua distribuição de probabilidade é

$$P_W(w, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \exp\left[-\frac{w^2}{2t}\right]. \quad (2.31)$$

4. Dado que $W(t_0) = w_0$, temos

$$W(t) - w_0 = \int_{t_0}^t \xi(t') dt' \quad (2.32)$$

cuja variância é (a prova é análoga à do item 2)

$$\sigma_{W-w_0}^2 = t - t_0, \quad (2.33)$$

portanto, sua distribuição de probabilidade é

$$T(w, t | w_0, t_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t-t_0)}} \exp\left[-\frac{(w-w_0)^2}{2(t-t_0)}\right] \quad (2.34)$$

A densidade de probabilidade acima é chamada de densidade condicional. Assim, $T(w, t | w_0, t_0)dw$ é a probabilidade de ter um valor no intervalo $[w, w + dw]$ no tempo t dado o valor w_0 no tempo t_0 .

Chamamos $\Delta W = W(t + \Delta t) - W(t)$ de *incremento de Wiener* cuja distribuição é dada por (2.34). A largura da distribuição do incremento de Wiener é a raiz quadrada da variância de ΔW , isto é

$$\sigma_{\Delta W} = \sqrt{\Delta t}. \quad (2.35)$$

Este fato tem conseqüências bastantes interessantes, uma delas é que a derivada temporal do processo de Wiener não existe. Pois, segundo a definição de derivada temos

$$\frac{dW(t)}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{W(t + \Delta t) - W(t)}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\Delta t}} \rightarrow \infty. \quad (2.36)$$

Essa conclusão parece ser contraditória com a definição do processo de Wiener (2.29). Pois segundo ela, a derivada de $W(t)$ deveria resultar em $\xi(t)$. Isso ocorre porque o processo estocástico $\xi(t)$, com uma função correlação delta de Dirac, não é matematicamente bem definido. Por essa razão que os matemáticos preferem definir o processo de Wiener por meio das propriedades listadas acima.

Equações diferenciais estocásticas com ruído aditivo

Como discutido, a equação de Langevin é uma equação diferencial estocástica por causa da adição do termo aleatório. A equação (2.7) é uma equação diferencial estocástica com ruído aditivo. Genericamente podemos escrevê-la da seguinte maneira

$$\dot{x}(t) = A(x(t), t) + B\xi(t), \quad (2.37)$$

onde B é uma constante, o que caracteriza o ruído aditivo. Quando $B = B(x(t))$ dizemos que o ruído é multiplicativo. Note que uma dependência explícita de B em t não é relevante para essa distinção. Vamos considerar apenas equações diferenciais estocásticas com ruídos aditivos. Para transformar a equação acima na forma diferencial, primeiro vamos integrá-la de t a $t + dt$

$$\int_t^{t+dt} dx(t') = \int_t^{t+dt} A(x(t')) dt' + B \int_t^{t+dt} \xi(t') dt'.$$

No limite de $dt \rightarrow 0$ temos

$$x(t + dt) - x(t) = \overline{A(x)} dt + B\Delta W,$$

onde $\overline{A(x)}$ é o valor médio de $A(x(t))$ no intervalo $(t, t + dt)$ e, no último, termo usamos a definição do processo de Wiener. A média $\overline{A(x)}$ difere do valor $A(x(t))$ por, no mínimo, um valor que dependa de dt . Como só estamos interessados em manter termos de ordem dt , o erro que cometemos ao substituir $\overline{A(x)}$ por $A(x(t))$ é desprezível no limite $dt \rightarrow 0$. Portanto, podemos escrever

$$dx(t) = A(x(t))dt + BdW.$$

Para integrar numericamente essa equação temos que aprender como simular o termo BdW . Lembrando que o incremento de Wiener, $dW(t)$, é um processo estocástico gaussiano de largura $\sigma = \sqrt{dt}$ (ver equação (2.35)) podemos escrever

$$x(t + dt) - x(t) = A(x(t))dt + B\sqrt{dt}\xi_G, \quad (2.38)$$

onde ξ_G é um número aleatório com distribuição normal, ou seja, é gaussiano com média nula e variância 1. Note que o termo aleatório é proporcional a \sqrt{dt} e, portanto, é dominante em relação ao termo proporcional a dt . Podemos usar vários métodos para integrar o termo proporcional a dt , mas os erros cometidos durante a integração desse termo não afetam significativamente a solução sendo que o termo aleatório domina. Por essa razão, costuma-se usar mesmo o método de integração de Euler, apesar de existirem versões estocásticas de outros métodos de integração, como o de Runge-Kutta, etc.

O procedimento de integração a partir de agora é simples. Dividimos o intervalo de integração $(0, T)$ em N intervalos de tamanho $\tau = T/N$ de modo que o tempo assuma os valores discretos $t_n = n\tau$ com $n = 1, 2, 3, \dots, N$. O valor da variável estocástica no tempo t_{n+1} , $x_{n+1} = x(t_{n+1})$, é obtido de acordo com

$$x_{n+1} = x_n + A(x_n)\tau + B\sqrt{\tau}\xi_n, \quad (2.39)$$

onde $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{N-1}$ são números aleatórios gaussianos independentes cuja média é nula e variância é 1. Note que precisamos fornecer a condição inicial $x(t = 0) = x_0$.

Para a equação de Langevin (2.7) temos $A(v) = -\gamma v$ e $B^2 = q = 2\gamma k_B T/m$, onde trocamos x pela velocidade $v = dx/dt$ da partícula. Assim, de (2.39), temos

$$v_{n+1} = v_n - \gamma v\tau + \sqrt{\frac{2\gamma k_B T\tau}{m}}\xi_n. \quad (2.40)$$

2.2 A Equação de Fokker-Planck

2.2.1 Equação de Movimento para a Distribuição de Probabilidade

Na equação de Langevin (2.7), $\Gamma(t)$ é uma variável estocástica, ou seja, muda de um sistema para outro no ensemble. Dessa forma, a velocidade também varia de um sistema para outro, portanto, ela também será uma variável estocástica. Sendo assim, é pertinente pensar na probabilidade de encontrar a velocidade no intervalo $(v, v + dv)$, ou de outro modo, no número de sistemas no ensemble cujas velocidades estão em tal intervalo dividido pelo número total de sistemas do ensemble. Como v é uma variável contínua, podemos introduzir a densidade de probabilidade (ou distribuição de probabilidade) $W(v)$ e obter a probabilidade de encontrar a velocidade da partícula no intervalo $(v, v + dv)$ multiplicando a densidade de probabilidade pela largura dv do intervalo, $W(v)dv$.

O processo estocástico $v(t)$ é gaussiano. Essa conclusão é obtida diretamente de (2.15), que mostra que $v(t)$ é uma combinação linear de todos os valores assumidos por $\Gamma(t')$ no intervalo

$0 \leq t' \leq t$. É conhecido da teoria de probabilidades que a distribuição gaussiana é invariante sob uma transformação linear de variáveis aleatórias [30]. Assim segue que o valor de $v(t)$ possui distribuição gaussiana. Além disso, $v(t)$ é um processo markoviano, ou seja, dados os valores do processo nos tempos $t_1 > t_2 > \dots > t_m$, a densidade condicional de probabilidade de $v(t)$, para $t > t_1$ depende apenas da condição mais recente, isto é, de $v(t_1)$ e t_1 . O resto da história, anterior ao tempo t_1 , não importa. Mas observe que t_1 é um tempo arbitrário, menor que t . O processo $v(t)$ é markoviano devido ao fato de (2.7) ser unicamente determinada pela condição inicial $v(0) = v_0$ para $\Gamma(t)$ dado e da força de Langevin ser delta-correlacionada, ou seja, um valor de $\Gamma(t)$ num tempo anterior $t < t_{n-1}$ não pode mudar a probabilidade condicional num tempo posterior $t > t_{n-1}$ ($\Gamma(t)$ e $\Gamma(t')$ são independentes para $t \neq t'$). A densidade condicional $P(v, t | v_1, t_1)$ é função de $t - t_1$, sendo este um processo estacionário (as propriedades estatísticas independem do tempo).

A densidade de probabilidade $W(v, t)$ depende de t e da probabilidade inicial (condição inicial). A equação de movimento para $W(v, t)$ é dada por

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \gamma \frac{\partial (vW)}{\partial v} + \gamma \frac{k_B T}{m} \frac{\partial^2 W}{\partial v^2}. \quad (2.41)$$

É importante notar que a equação acima é válida para $W(v, t)$ somente quando v obedece a equação de Langevin (2.7). A equação acima é a forma mais simples da equação de Fokker-Planck em uma dimensão cuja forma geral é a seguinte

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[D^{(1)}(x) W(x, t) \right] + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[D^{(2)}(x) W(x, t) \right]. \quad (2.42)$$

Na equação acima, $D^{(2)}(x) > 0$ é chamado de coeficiente de difusão e $D^{(1)}(x)$ o coeficiente de arrasto. Os coeficientes de arrasto e difusão podem depender do tempo.

É interessante pensar em como uma equação de Fokker-Planck surge. Ela surge como uma ferramenta para tratar problemas cujo tratamento microscópico é impossível (assim como o movimento browniano). Geralmente, usa-se argumentos heurísticos para obter a descrição estocástica do problema. O tratamento heurístico consiste em adicionar forças aleatórias às equações determinísticas e obter equações de movimento estocásticas que são equivalentes à equação de Fokker-Planck. A intensidade das forças aleatórias é obtida por meio de outros argumentos, por exemplo, o teorema da equipartição de energia (assim como foi usado para a equação de Langevin (2.7)).

Ao resolvermos a equação de Fokker-Planck, obtemos a densidade de probabilidade $W(x, t)$ através da qual podemos calcular a média de qualquer variável macroscópica da seguinte ma-

neira

$$\langle A(x, t) \rangle = \int A(x, t) W(x, t) dx.$$

A aplicação da equação de Fokker-Planck não está restrita apenas a sistemas próximos do equilíbrio térmico. Assim, ela pode ser aplicada também a sistemas longe do equilíbrio térmico como lasers [28, 31], por exemplo. Além disso, a equação de Fokker-Planck pode ser usada para descrever tanto sistemas estacionários quanto sistemas dinâmicos.

2.2.2 Obtendo a Equação de Fokker-Planck

Nessa seção vamos mostrar como obter a equação de Fokker-Planck (2.41) através da equação de Langevin (2.7) [30]. Para começar vamos escrever a equação de Langevin da seguinte forma

$$\dot{x} = f(x) + \Gamma(t), \quad (2.43)$$

um pouco mais geral do que (2.7), a qual pode ser obtida fazendo $f(x) = -\gamma x$. Vamos assumir que $f(x)$ é uma função apenas de x e que $\Gamma(t)$ é uma variável estocástica com as seguintes propriedades

$$\begin{aligned} \langle \Gamma(t) \rangle &= 0 \\ \langle \Gamma(t) \Gamma(t') \rangle &= q \delta(t - t'). \end{aligned} \quad (2.44)$$

Vamos discretizar o tempo em intervalos de tempo τ . Assim, o valor de x no instante t será x_n e a equação de Langevin na forma discretizada será

$$x_{n+1} = x_n + \tau f_n + \sqrt{q\tau} \Gamma_n \quad (2.45)$$

onde $f_n = f(x_n)$ e Γ_n é uma variável aleatória com distribuição normal, ou seja, $\langle \Gamma_n \rangle = 0$ e $\langle \Gamma_n^2 \rangle = 1$.

Seja $W_n(x_n)$ a distribuição de probabilidade da variável x_n e $g_n(k)$ sua função característica definida pela seguinte expressão

$$g_n(k) \equiv \langle e^{ikx_n} \rangle = \int e^{ikx_n} W_n(x_n) dx_n, \quad (2.46)$$

ou seja, a função característica é a transformada de Fourier da distribuição de probabilidade. Logo, podemos obter $W_n(x_n)$ a partir de $g_n(k)$ por meio da antitransformada de Fourier

$$W_n(x_n) = \frac{1}{2\pi} \int e^{-ix_n k} g(k) dk. \quad (2.47)$$

Usando (2.45) e (2.46) podemos escrever

$$g_{n+1}(k) \equiv \langle e^{ikx_{n+1}} \rangle = \langle e^{ik[x_n + \tau f_n + \sqrt{q\tau}\Gamma_n]} \rangle \quad (2.48)$$

que pode ser escrita como

$$g_{n+1}(k) = \langle e^{ik[x_n + \tau f_n]} \rangle \langle e^{ik\sqrt{q\tau}\Gamma_n} \rangle, \quad (2.49)$$

uma vez que x_n e Γ_n são independentes. Agora vamos expandir $g_{n+1}(k)$ até primeira ordem em τ para obter

$$\begin{aligned} g_{n+1}(k) &= \langle e^{ikx_n} \{1 + ik\tau f_n\} \rangle \langle 1 + ik\sqrt{q\tau}\Gamma_n - \frac{k^2 q\tau}{2} \Gamma_n^2 \rangle \\ &= \left[\langle e^{ikx_n} \rangle + ik\tau \langle f_n e^{ikx_n} \rangle \right] \left[1 - \frac{k^2 q}{2} \tau \right] \\ &= g_n(k) + \tau \left\{ ik \langle f_n e^{ikx_n} \rangle - \frac{q}{2} k^2 \langle e^{ikx_n} \rangle \right\}, \end{aligned} \quad (2.50)$$

onde usamos as seguintes propriedades $\langle \Gamma_n \rangle = 0$ e $\langle \Gamma_n^2 \rangle = 1$.

Vamos precisar das seguintes identidades:

$$(i) \quad ik \langle f(x) e^{ikx} \rangle = \langle f(x) \frac{d}{dx} e^{ikx} \rangle = - \int e^{ikx} \frac{d}{dx} [f(x) W_n(x)] dx \quad (2.51)$$

$$(ii) \quad -k^2 \langle e^{ikx} \rangle = \langle \frac{d^2}{dx^2} e^{ikx} \rangle = \int e^{ikx} \frac{d^2}{dx^2} W_n(x) dx \quad (2.52)$$

que podem ser provadas facilmente integrando-se por partes. Note que os termos de contorno devem ser nulos, porque a condição de normalização de $W(x, t)$ implica em $W(x, t) \rightarrow 0$ para $|x| \rightarrow \infty$. Usando as identidades (i) e (ii) em (2.50) obtemos

$$\begin{aligned} \int e^{ikx} W_{n+1}(x) dx &= \int e^{ikx} W_n(x) dx \\ &+ \tau \left\{ - \int e^{ikx} \frac{d}{dx} [f(x) W_n(x)] dx + \frac{q}{2} \int e^{ikx} \frac{d^2}{dx^2} W_n(x) dx \right\}, \end{aligned}$$

onde usamos a definição (2.46) de $g_n(k)$. Da equação acima podemos concluir que

$$\frac{W(x, t + \tau) - W(x, t)}{\tau} = - \frac{d}{dx} [f(x) W(x, t)] + \frac{q}{2} \frac{d^2}{dx^2} W(x, t),$$

onde substituímos $W_{n+1}(x)$ por $W(x, t + \tau)$ e $W_n(x)$ por $W(x, t)$. No limite $\tau \rightarrow 0$, obtemos

$$\frac{\partial}{\partial t} W(x, t) = - \frac{\partial}{\partial x} [f(x) W(x, t)] + \frac{q}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} W(x, t). \quad (2.53)$$

Se fizermos $x = v$ e $f(x) = -\gamma x = -\gamma v$ e substituirmos o valor de $q = 2\gamma k_B T / m$ (equação 2.22), obtemos a equação de Fokker-Planck (2.41).

2.2.3 Equações de Kramers e de Smuluchowski

A equação de Klein-Kramers [32] ou apenas equação de Kramers [33] e a equação de Smuluchowski [34] são casos especiais da equação de Fokker-Planck. A equação de Kramers é uma equação de movimento para a densidade conjunta de probabilidade da posição e da velocidade de partículas realizando movimento browniano em um campo externo. No caso unidimensional escrevemos:

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \left[-\frac{\partial}{\partial x} v + \frac{\partial}{\partial v} \left(\gamma v - \frac{F(x)}{m} \right) + \frac{\gamma k_B T}{m} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right] W, \quad (2.54)$$

onde γ é a constante de fricção, m é a massa da partícula, T é a temperatura do fluido, k_B é a constante de Boltzmann, $F(x) = -mf'(x)$ é a força externa derivada do potencial $mf(x)$. Sem a força externa e sem a dependência em x (2.54) se reduz a (2.41).

A equação diferencial estocástica correspondente a (2.54) é

$$\left. \begin{aligned} \dot{x} &= v \\ \dot{v} &= -\gamma v + F(x)/m + \Gamma(t) \\ \langle \Gamma(t)\Gamma(t') \rangle &= 2\gamma(k_B T/m)\delta(t-t'). \end{aligned} \right\} \quad (2.55)$$

Na ausência da força externa $F(x)$, as duas últimas equações acima se reduzem a (2.7) e a (2.10,2.22), respectivamente. Podemos juntar as duas primeiras equações e escrever a equação de movimento

$$m\ddot{x} + m\gamma\dot{x} = F(x) + m\Gamma(t). \quad (2.56)$$

No estado estacionário, a solução de (2.54) é dada pela distribuição de Boltzmann

$$\begin{aligned} W_{est}(x, v) &= N e^{-E/k_B T} \\ E &= mv^2/2 + mf(x), \end{aligned} \quad (2.57)$$

onde N é a constante de normalização. Essa solução pode ser checada diretamente por inserção.

Para valores grandes da constante de fricção γ , podemos desprezar a derivada segunda em relação ao tempo em (2.56) e obter a equação diferencial estocástica

$$\dot{x} = \frac{F(x)}{m\gamma} + \frac{\Gamma(t)}{\gamma} \quad (2.58)$$

cuja equação de Fokker-Planck correspondente é

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \frac{1}{m\gamma} \left[-\frac{\partial}{\partial x} F(x) + k_B T \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] W, \quad (2.59)$$

onde $W = W(x, t)$. Essa equação é conhecida como equação de Smuluchowski.

3 *Redes de Pinças Ópticas*

Em 1970, Arthur Ashkin relatou, pela primeira vez, a observação de forças em partículas dielétricas com tamanho da ordem de micrômetros devido ao espalhamento e ao gradiente de um feixe de luz [35]. Numa série de trabalhos posteriores, Ashkin mostrou que um feixe de luz altamente focado é capaz de manter partículas microscópicas presas em três dimensões, o que é conhecido hoje como pinça óptica [36]. O método de pinçamento óptico foi usado por Ashkin e colaboradores em vários experimentos que vão desde a captura de átomos neutros [37] até a manipulação de vírus e bactérias vivas [38, 39]. Hoje em dia, a pinça óptica ainda é um assunto de muito interesse na Física e também na Biologia. Devido à atual capacidade de se medir deslocamentos com precisão da ordem de nanômetros (ou até melhor), a pinça óptica é atualmente aplicada no estudo de moléculas motoras a nível molecular, na física de sistemas coloidais e mesoscópicos e na investigação de propriedades visco-elásticas de polímeros e biopolímeros (ver [40] para essas e outras aplicações).

Na seção seção 3.1 descrevemos os princípios físicos básicos de uma pinça óptica e na seção 3.2 discutimos um experimento do nosso interesse, que envolve partículas coloidais em redes de pinças ópticas.

3.1 *A Pinça Óptica*

Uma pinça óptica é capaz de manipular partículas de tamanho da ordem de micrômetros e nanômetros, exercendo sobre elas uma força extremamente pequena (da ordem de $10^{-10} - 10^{-12}$ newtons) via um feixe de laser altamente focalizado. O feixe é tipicamente focalizado usando uma lente objetiva. Uma partícula dielétrica perto do foco experimenta uma força devido à transferência de momento no espalhamento dos fótons incidentes. Tradicionalmente, a força resultante é decomposta em duas componentes: (1) uma força de espalhamento cuja direção é a da luz incidente e (2) uma força de gradiente cuja direção é a do gradiente espacial da intensidade média do campo eletromagnético. (A média é temporal.) Essa decom-

posição é meramente um meio conveniente e intuitivo de discutir as forças ópticas, uma vez que o surgimento dessas forças é devido exatamente ao mesmo fenômeno físico: o espalhamento de luz.

A força de espalhamento é a mais fácil de se interpretar. A luz incidente atinge a partícula em uma direção apenas e pode ser espalhada em qualquer direção ou ser absorvida pela partícula. Como consequência há uma transferência de momento da luz incidente para a partícula. Para um espalhamento isotrópico, as forças em todas as direções se cancelam exceto na direção da luz incidente. Em uma situação convencional a força de espalhamento domina e a partícula não fica presa. Contudo, se existe um gradiente muito intenso (como é o caso próximo ao foco de um laser) a segunda componente da força deve ser levada em consideração. Sabemos que um dipolo em um campo não-homogêneo sofre a ação de uma força na direção do gradiente do campo [41]. Assim, a força de gradiente surge por causa da interação entre os dipolos flutuantes induzidos na partícula pelo laser e o campo não-homogêneo próximo ao foco do laser. Num sistema estável em três dimensões, a componente da força que puxa a partícula para a região focal deve ser maior do que a força que empurra a partícula para fora dessa região. O balanço entre essas duas forças é que mantém a partícula presa. Uma consequência direta disso é que a posição de equilíbrio fica levemente deslocada do foco na direção de incidência do feixe. Para deslocamentos suficientemente pequenos a força de gradiente restauradora é linear em relação ao deslocamento do centro, ou seja, segue a lei de Hooke.

No tratamento teórico da pinça óptica, existem dois casos limites onde a força na esfera pode ser calculada. Quando o raio a da esfera é muito maior do que o comprimento de onda λ do laser, $a \gg \lambda$, as forças podem ser calculadas usando óptica geométrica [42, 43]. Quando a esfera é muito menor do que o comprimento de onda do laser ($a \ll \lambda$), condição de espalhamento de Rayleigh, as forças são calculadas tratando a partícula como um dipolo pontual [44]. No caso intermediário, $a \sim \lambda$, é preciso uma teoria eletromagnética mais completa para dar uma descrição precisa [45, 46].

Por simplicidade, vamos nos concentrar apenas na descrição qualitativa do primeiro caso ($a \gg \lambda$) que está esquematizado na Figura 3.1. A refração sofrida pela luz incidente na esfera corresponde a uma mudança no momento carregado pela luz. Da terceira lei de Newton, sabemos que um momento de igual intensidade mas de sentido oposto é transferido para a esfera. A força na esfera devido à troca de momento é proporcional à intensidade da luz. Quando o índice de refração da partícula é maior do que o do meio que a cerca, a força óptica que surge da refração é na direção do gradiente de intensidade. No caso contrário, para um índice de refração menor do que o do meio, a força é na direção oposta ao gradiente de intensidade.

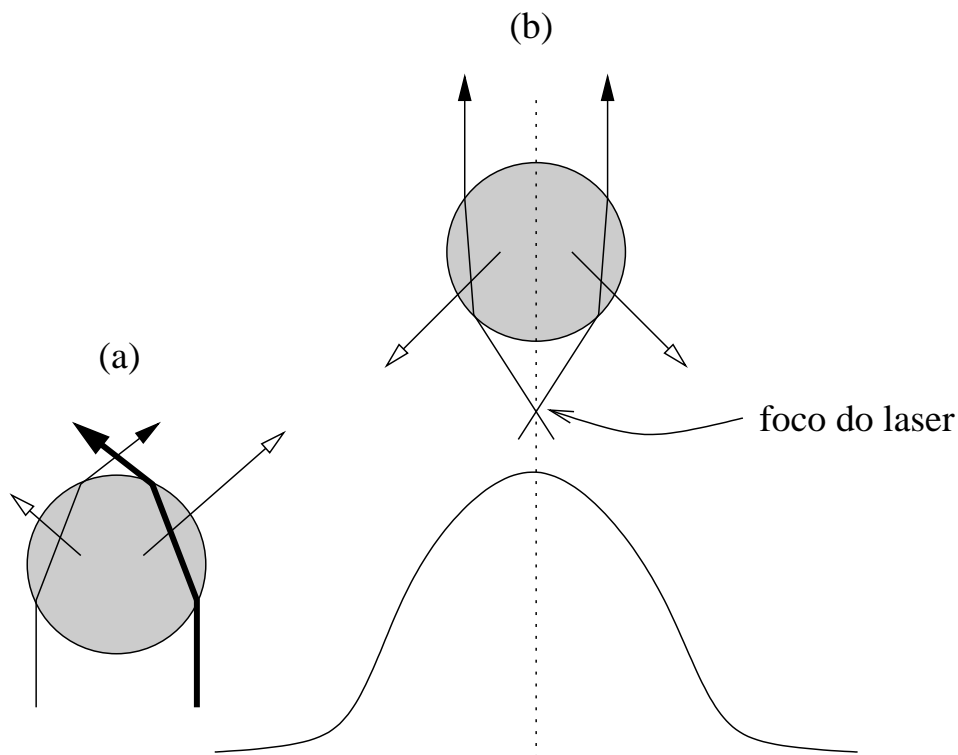


Figura 3.1: Esquemática do princípio de funcionamento de uma pinça óptica. O perfil de intensidade do laser é dado por uma gaussiana. As setas pretas indicam raios de luz sendo a espessura da linha correspondente a intensidade do raio enquanto que as setas brancas representam as forças de gradiente sendo o comprimento da seta relacionado à intensidade da força.

Na Figura 3.1(a) temos uma esfera transparente sendo iluminada por um feixe de luz paralelo cuja intensidade aumenta da esquerda para a direita (essa situação acontece quando o feixe de laser não está focalizado, a extensão para o caso onde o feixe de laser está focalizado é análoga mas um pouco mais complicada e menos sugestiva). Dois raios de diferentes intensidades (representados por setas pretas com linhas de espessuras diferentes) do feixe são mostrados. A refração dos raios na esfera muda o momento dos fótons, igual a mudança que ocorre na direção dos raios incidentes e refratados. A conservação do momento exige que o momento da esfera mude da mesma quantidade mas com sinal oposto, o que resulta nas forças desenhadas como setas brancas. A força resultante na esfera é para a direita, na direção do gradiente de intensidade, e levemente para cima. Essa força leva a esfera para o eixo de simetria do laser. Quando o feixe de laser está focalizado, os raios desenhados na Figura 3.1(a) são inclinados (mas ainda de intensidade diferentes, devido ao perfil gaussiano do laser), apesar disso, o mesmo fenômeno ocorre: a esfera é atraída para o eixo de simetria do laser. Na Figura 3.1(b), a esfera está no eixo de simetria do laser, onde a luz está focada e produz um gradiente de intensidade tridimensional. Nesse caso, a esfera é iluminada por um feixe de luz focalizado com um gradiente na direção radial. Os raios representativos (de mesma intensidade) sobre o eixo são desenhados,

mas note que nesse exemplo a mudança no momento leva a uma força resultante na direção do foco. Setas brancas representam as forças. As forças laterais se cancelam e a força axial é balanceada pela força devido à pressão de radiação (não mostrada na figura) provocada pela reflexão da luz na superfície da esfera. Se a esfera se mover no feixe focalizado as forças ópticas não-balanceadas trarão ela de volta para a posição de equilíbrio que fica localizada no eixo do laser ligeiramente além do foco.

3.2 Partículas Coloidais em Redes de Pinças Ópticas

O desenvolvimento de redes de pinças ópticas despertou a atenção para o estudo de transporte em sistemas mesoscópicos cujos entendimento e controle são de grande importância na biofísica e na nanotecnologia. Uma rede de pinças ópticas não passa de um conjunto de poços eletromagnéticos gaussianos (ou pinças ópticas) distribuídos uniformemente no espaço, que são gerados por meio da difração de um único feixe de laser em um modulador espacial de luz [47]. Em poucas palavras, os experimentos realizados consistem de partículas coloidais fluindo através de uma rede de pinças ópticas. Nesse sistema, uma partícula pode ficar presa em algum dos mínimos de potencial da rede de pinças ópticas, o que muda completamente a trajetória da partícula.

Esse sistema tem sido alvo de muitos estudos experimentais, teóricos e simulacionais [13, 14, 48, 12, 15, 16, 49, 47, 50, 17]. Dentre os vários tipos de experimentos que podem ser realizados, vamos descrever, em linhas gerais, o funcionamento do chamado fracionamento óptico [49], o qual pode ser facilmente transformado, com pequenas modificações, numa realização experimental do TASEP.

Imagine uma partícula sob a ação de uma força externa constante numa dada direção se movendo numa região onde existe uma rede de pinças ópticas. Dependendo da intensidade e da orientação da força externa, a partícula pode ficar presa em uma direção e livre na outra. Isso faz com que as partículas desviem da direção do fluxo externo (força externa). Os experimentos mostram que o ângulo de desvio depende de características da partícula como: forma, composição e, principalmente, tamanho [51, 13, 14]. A habilidade de seletivamente defletir uma fração dos constituintes de uma mistura da direção em que a mistura está fluindo é útil para separar e purificar amostras mesoscópicas [13]. Uma implementação prática desse processo é o fracionamento óptico.

O fracionamento óptico é baseado na competição entre as forças de gradiente exercidas pelos poços ópticos e a força externa aplicada, como mostra a Figura 3.2. A trajetória da partícula

pode ser desviada, devido ao encontro com a rede unidimensional de pinças ópticas, o suficiente para que a partícula passe de um poço para outro seguindo a linha de pinças ópticas. Diz-se que a trajetória da partícula está cineticamente presa à rede. A seletividade no fracionamento óptico ocorre porque objetos com tamanhos, formas e composições diferentes experimentam poços de energia potencial diferentes no mesmo campo eletromagnético; a periodicidade enfatiza essa diferença. Os objetos que escapam da rede fluem na direção da força externa, enquanto que os objetos presos na rede podem ser desviados dessa direção. As duas frações resultantes podem ser coletadas separadamente.

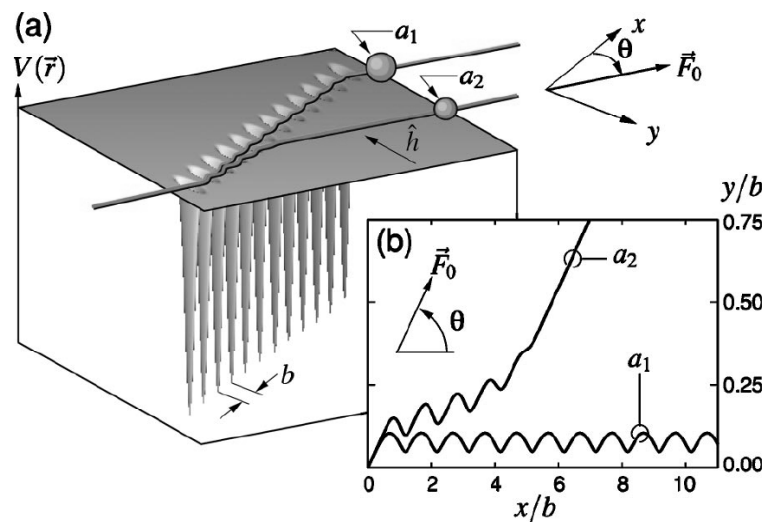


Figura 3.2: O princípio de fracionamento óptico. (a) Partículas diferentes sob a ação de uma força externa F_0 fluindo através de uma rede de pinças ópticas inclinada de um ângulo θ . As partículas que interagem fortemente com a rede (a_1) são desviadas e as outras (a_2) não. (b) Trajetórias para as esferas grandes ($a_1 = 0,79\mu\text{m}$) e pequenas ($a_1 = 0,5\mu\text{m}$), segundo a fonte da figura: [49].

Não é a intenção desse texto esclarecer todos os detalhes técnicos envolvidos na realização desse experimento. Recomenda-se aos leitores interessados que sigam as referências. O importante é que esses experimentos oferecem a possibilidade de uma realização experimental do TASEP, o que nos motivou a propor o modelo do TASEP em espaço contínuo. Mais detalhes sobre a realização do TASEP no laboratório são discutidos no próximo capítulo.

4 *Versão Contínua do TASEP*

O foco desse trabalho está no estudo de um modelo em espaço contínuo correspondente ao TASEP numa rede unidimensional. O motivo para esse estudo é que um modelo em espaço contínuo é mais adequado para comparações com futuras realizações experimentais do TASEP. Uma realização do TASEP no laboratório é esperada devido a recentes experimentos envolvendo partículas coloidais em redes de pinças ópticas. Apesar de tal experimento ainda não ter sido realizado, é interessante descrever, grosseiramente, como ele seria realizado no laboratório, é o que fazemos na primeira seção deste capítulo. As duas últimas seções são dedicadas à descrição do modelo em espaço contínuo abordando os métodos de simulação usados: a integração numérica da equação de Langevin e o método de Monte Carlo dinâmico.

4.1 O Esquema Experimental do TASEP

Como estamos interessados no TASEP unidimensional, uma idéia é estudar o fluxo de esferas mergulhadas num fluido que atravessa, com velocidade constante, um tubo cilíndrico (ver Figura 4.1). O raio dessas esferas é ligeiramente menor do que o raio do tubo a fim de que apenas uma esfera passe por vez pela seção reta do tubo. Dentro do tubo existe um potencial eletromagnético externo e periódico, a rede de pinças ópticas unidimensional. Na extremidade esquerda do tubo, as esferas são inseridas com uma taxa α e na extremidade direita do tubo, são removidas com uma taxa β .

As esferas tendem a ficar mais tempo próximas aos mínimos do potencial externo. Assim, um mínimo do potencial, que chamaremos de poço, corresponde a um sítio da rede. As esferas flutuam dentro de um poço devido aos choques com as moléculas do fluido (dinâmica browniana). Se escolhermos adequadamente a velocidade do fluido, não haverá chance nenhuma da esfera sair de um poço e voltar para um poço que está à esquerda desse. Devido às flutuações térmicas, em algum momento a esfera irá receber energia suficiente para vencer a barreira de potencial que a prende e passar para o próximo poço localizado à direita do poço de origem. Isso representa a assimetria do TASEP em rede, partículas só pulam para sítios da direita. O

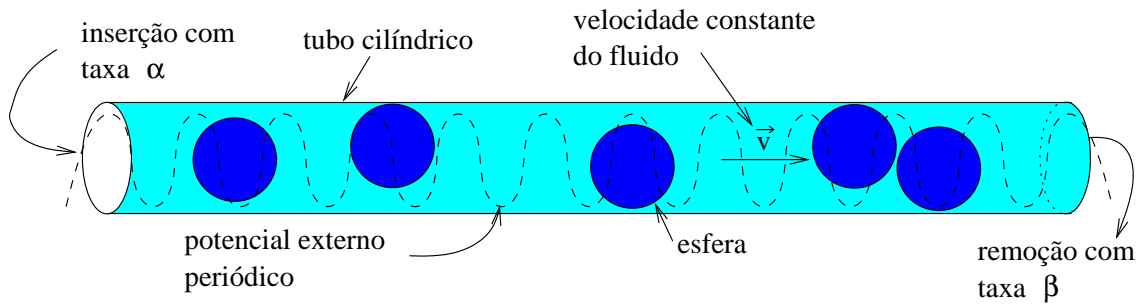


Figura 4.1: Um possível esquema experimental do TASEP unidimensional.

raio do tubo é escolhido ligeiramente maior do que o raio das esferas de modo a permitir uma folga para as esferas se moverem ao longo do tubo e evitar ultrapassagens. A periodicidade do potencial é tal que um mínimo de potencial pode ser ocupado apenas por uma esfera de cada vez. Isso corresponde, no modelo em rede, ao fato da ocupação máxima de um sítio ser um. O fluxo pode ser gerado por uma diferença de pressão entre as extremidades do tubo. A inserção e a remoção das esferas podem ser controladas anexando reservatórios de esferas com densidades convenientes às extremidades do tubo.

Essa é uma descrição bem superficial de como seria o experimento, mas nada parece impossível de ser realizado e o experimento é idealizado de modo a possuir o máximo possível de semelhança com o TASEP em rede.

4.2 O Modelo em Espaço Contínuo

O esquema experimental é importante para a modelagem computacional do TASEP contínuo uma vez que o modelo é completamente baseado nas idéias acima. A idéia é simular o movimento das esferas dentro do tubo usando dinâmica browniana, ou seja, descrever um sistema de partículas brownianas interagentes num potencial externo periódico sob a ação de uma força constante. Para simplificar vamos considerar o sistema como sendo unidimensional, ou seja, para determinar a posição de cada partícula precisamos apenas de uma componente, por exemplo a distância da extremidade esquerda do tubo até a partícula. É possível um estudo em dimensões maiores, considerando a possibilidade da partícula se mover na direção radial do tubo, mas isso é objetivo de futuras investigações. Por enquanto, vamos nos ater a uma dimensão apenas. A equação que descreve o movimento da i -ésima partícula nesse sistema pode ser escrita da seguinte maneira

$$m\ddot{x}_i(t) = -b[\dot{x}_i(t) - v] - \frac{\partial V_{ext}(x_i)}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} [V_{int}(x_{i,i-1}) + V_{int}(x_{i,i+1})] + m\Gamma_i(t) \quad (4.1)$$

onde x_i , \dot{x}_i e \ddot{x}_i são, respectivamente, a posição, a velocidade e a aceleração da partícula i , $x_{i,j} = x_j - x_i$ e v é a velocidade constante do fluido. Na equação acima, V_{ext} é a energia potencial externa devida à rede de pinças ópticas e V_{int} é a energia potencial de interação entre as partículas. O primeiro termo representa a fricção que surge devido ao movimento da partícula em relação ao fluido (ver seção 2.1.1) com b sendo a intensidade do amortecimento, note que o termo entre colchetes é a velocidade da partícula em relação ao fluido e não apenas a velocidade da partícula. Para uma esfera de raio r , a Lei de Stokes nos dá:

$$b = 6\pi\mu r, \quad (4.2)$$

onde μ é a viscosidade do fluido, por exemplo, para a água $\mu_a = 0.01 \text{ g/cm} \cdot \text{s}$. O último termo em (4.1) é um ruído aleatório com as seguintes propriedades:

$$\begin{cases} \langle \Gamma_i \rangle = 0 \\ \langle \Gamma_i(t) \Gamma_j(t') \rangle = q \delta_{i,j} \delta(t - t'), \end{cases} \quad (4.3)$$

o que torna a equação (4.1) uma equação de Langevin. De (2.22) sabemos que

$$q = \frac{2\gamma k_B T}{m} = \frac{2bk_B T}{m^2}, \quad (4.4)$$

pois para que a equação de Langevin (2.7) seja idêntica a (4.1) devemos fazer $v = 0$, tirar os termos de energia potencial e substituir γ por b/m .

A equação (4.1) junto com as propriedades (4.3) são os requisitos básicos para a dinâmica browniana. Especificando as energias potenciais externa e de interação obtemos o modelo em espaço contínuo equivalente ao TASEP em rede. As energias potenciais são discutidos na seção 4.2.1. Mas antes vamos fazer mais uma simplificação importante: desprezar o termo de inércia $m\ddot{x}_i(t)$ com a justificativa de que os tempos de interesse observacional são muito maiores que o tempo de relaxação da velocidade m/b , a saber $m/b \sim 10^{-8} \text{ s}$, para os valores que simulamos. Dessa forma a equação que precisamos resolver é:

$$\dot{x}_i(t) = v - \frac{1}{b} \frac{\partial V_{ext}(x_i)}{\partial x_i} - \frac{1}{b} \frac{\partial}{\partial x_i} [V_{int}(x_{i,i-1}) + V_{int}(x_{i,i+1})] + \frac{m}{b} \Gamma_i(t). \quad (4.5)$$

Note que supomos a velocidade v do fluido constante na modelagem acima. Isso seria verdade se o fluido fosse infinito. Neste caso, v seria a velocidade do fluido "no infinito", longe das esferas, e desprezando interações hidrodinâmicas. Se o tubo fosse livre de esferas, aplicando uma determinada diferença de pressão, Δp , o campo velocidade (desprezando efeitos de borda na entrada e na saída do tubo) seria $v_x = v_x(r)$ com r a distância do eixo central do tubo. O campo $v_x(r)$ é parabólico, sendo zero nas paredes e tendo um máximo no eixo central. Assim,

a velocidade não é constante, mas podemos atribuir uma velocidade média (sobre a seção reta do tubo) ao fluido, que realmente seria constante (independente de x e t). Em particular, existe uma descarga (massa de fluido fluindo por segundo) R independente de t .

Agora, a presença de uma esfera de raio ligeiramente menor do que o do tubo tem que modificar bastante o campo velocidade nas vizinhanças da esfera. No caso de um fluido infinito em três dimensões, se calcula a força sobre a esfera na base dessa solução (da equação de Navier-Stokes linearizada, no regime de baixos números de Reynolds), que leva à Lei de Stokes. Da mesma maneira, é possível calcular o campo velocidade no tubo, na presença de uma esfera, e calcular a força de arrasto na esfera [52]. Note também que na presença da esfera, a descarga muda, sob condições de Δp fixo. Por outro lado, deve ser possível, experimentalmente, realizar o processo a descarga constante. Nosso modelo descreve um experimento a descarga fixa, e não a pressão fixa. (É análoga um circuito a potencial fixo, ou a corrente fixa.)

Na equação (4.1) o parâmetro v pode ser interpretado como a velocidade, no estado estacionário, de uma partícula sozinha no tubo (sem a presença do potencial externo periódico), dado a descarga R . Podemos determinar v experimentalmente. E o parâmetro b não vem mais da Lei de Stokes, devido à geometria cilíndrica, mas também pode ser medido experimentalmente. Uma boa aproximação para b , no caso de esferas dentro do tubo, pode ser encontrada na referência [52]. Apesar de termos uma expressão para b que leva em consideração a presença do cilindro, nas nossas simulações desprezamos o cilindro e usamos para a intensidade do atrito b simplesmente a lei de Stokes dada por 4.2

4.2.1 Energias Potenciais

Uma rede de pinças ópticas é formada por um conjunto de poços de potencial gaussianos. Dessa forma, para que a energia potencial externa possa representar a rede de pinças ópticas ela deve ser periódica e cada poço deve ser aproximadamente uma gaussiana invertida como mostra a Figura 4.2.

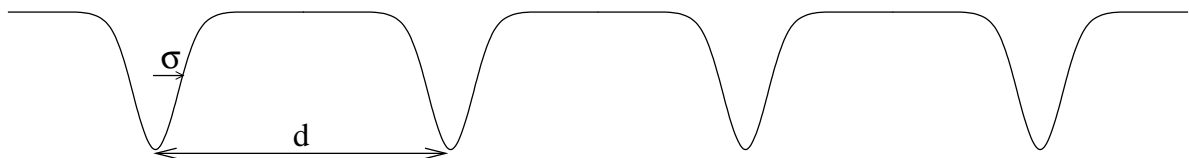


Figura 4.2: Rede de poços gaussianos igualmente espaçados. Note que os parâmetros σ e d controlam a forma do potencial.

A expressão para o potencial da figura acima é

$$V_G(x) = -V_0 \sum_{n=0}^N e^{-(y-dn)^2/2\sigma^2}, \quad (4.6)$$

onde σ dá a largura do poço e d a distância entre dois mínimos consecutivos. A função periódica mais simples que conhecemos e que se aproxima de uma soma de gaussianas invertidas é a função cosseno (ou seno). Para mostrar isso, vamos escrever a energia potencial externa como

$$V_{ext}(x) = -V_0 \cos\left(\pi \frac{x}{d_0}\right). \quad (4.7)$$

Essa função tem período $2d_0$ e mínimos em $x_j = 2jd_0$ com $j = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$. Queremos colocar uma gaussiana invertida em cada poço, então devemos ter $d = 2d_0$ (distância entre dois mínimos). Agora só resta determinar o valor de σ para que haja apenas uma partícula por poço. Veja a Figura 4.3, daí podemos concluir que $\sigma \simeq a/4$ (onde a é o diâmetro da esfera).

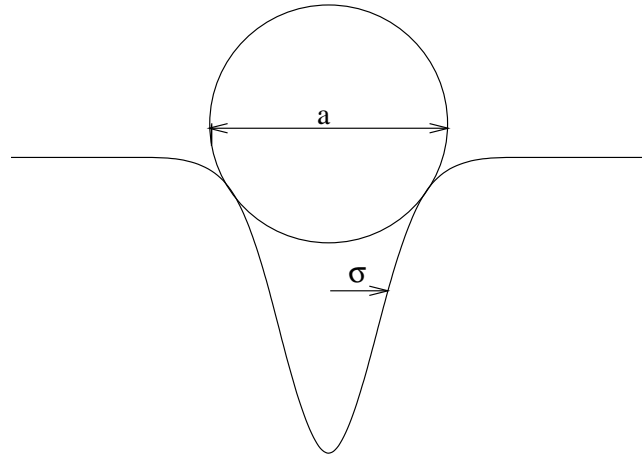


Figura 4.3: Uma esfera num poço gaussiano. Note que $\sigma \simeq a/4 = 1/2$.

O diâmetro da esfera é escolhido como sendo da ordem do período da energia potencial externa, ou seja, $a \sim 2d_0$ e $\sigma \simeq d_0/2$. Essa escolha é conveniente por duas razões. A primeira é que os mínimos de potencial ficam mais próximos e, portanto, eliminamos as regiões onde o potencial praticamente não varia e a partícula (na ausência de outras forças) fica em equilíbrio indiferente (ver Figura (4.2)). A segunda razão é que, com essa escolha, a energia potencial externa é muito bem aproximada pelo cosseno, como veremos a seguir.

A Figura 4.4 mostra V_G para $N = 20$, $\sigma = d_0/2$ e $d = 2d_0$. Note que a curva é praticamente senoidal. Para verificar calculamos os coeficientes de Fourier

$$a_n = \frac{2}{L} \int_0^L \cos(n\pi x) V_G(x) dx = \int_0^{2d_0} \cos\left(n\pi \frac{x}{d_0}\right) V_G(x) d\left(\frac{x}{d_0}\right), \quad (4.8)$$

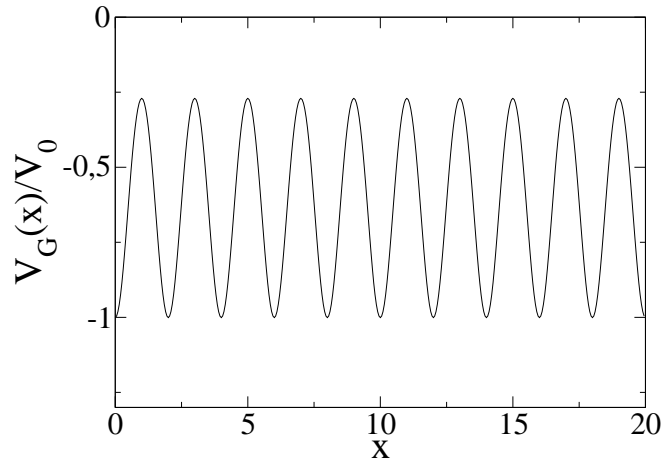


Figura 4.4: Energia potencial dada por (4.6) para $N = 20$ e $\sigma = d_0/2$.

onde $L = 2d_0$ é o período de $V_G(x)$ e obtemos

$$\begin{cases} a_0 = -0,627 \\ a_1 = 0,365 \\ a_2 = 9,010 \times 10^{-3}. \end{cases} \quad (4.9)$$

Note que a_2 é cerca de duas ordens de grandeza menor do que a_1 e podemos escrever com uma boa aproximação a soma de gaussianas como

$$V_G(x) = V_0 \left[a_0 + a_1 \cos \left(\pi \frac{x}{d_0} \right) \right].$$

Isso implica que, para os parâmetros escolhidos, a soma de gaussianas é bem aproximada por uma função cosseno. Para calcular a força externa, reduzimos o custo computacional quando usamos o cosseno no lugar da soma de gaussianas. Essa é a grande vantagem de se escolher uma função simples para representar a energia potencial externa periódica.

Para a interação entre partículas vizinhas vamos usar um potencial de caroço duro do tipo Lennard-Jones que pode ser escrito da seguinte maneira:

$$V_{int}(r) = U_0 \begin{cases} \left(\frac{a}{r}\right)^{12} - 1, & \text{se } r \leq a \\ 0, & \text{se } r \geq a, \end{cases} \quad (4.10)$$

onde a é o diâmetro da partícula e r a distância entre partículas vizinhas. O potencial de interação evita que duas ou mais partículas ocupem o mesmo poço, isso representa o fato das partículas terem dimensão (no experimento, são esferas quase rígidas, pois partículas coloidais não são, em geral, totalmente rígidas). Note que partículas que interagem com (4.10) são equivalentes a esferas de diâmetro a , por essa razão falamos em raio de partículas, apesar de

partícula se referir a um corpo sem dimensão. Vamos continuar usando o termo diâmetro de partículas, mas apenas para significar o fato de que estamos desprezando o movimento rotacional das esferas.

As energias externa e de interação dadas por (4.7) e (4.10), respectivamente, ainda não estão completamente especificadas. Devemos atribuir ainda valores às constantes V_0 e U_0 . Isso será feito na seção 4.2.3. Mas antes é interessante discutir as unidades físicas a serem usadas.

4.2.2 Dimensões Físicas do Modelo

Quanto mais próximo possível da realidade for o modelo, maior será o seu valor para guiar o desenho de um experimento e na eventual comparação com dados experimentais. Para transferir o experimento do laboratório para o computador, a fim garantir a realidade do modelo e também de facilitar a sua comparação com possíveis experimentos, usamos unidades físicas reais nos parâmetros que compõem o modelo. Vamos definir um sistema de unidades que será mais conveniente nesse modelo. As unidades básicas serão:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{energia: } k_B T = 4,1419512 \times 10^{-21} J \\ \text{espaço: } \mu m \\ \text{tempo: } s \end{array} \right. \quad (4.11)$$

onde $k_B = 1.3806504 \times 10^{-23} J/K$ é a constante de Boltzmann (em joule/kelvin) e $T = 300K$ é a temperatura fixa do ambiente (em kelvin). Agora teremos que escrever as constantes que aparecem na equação de Langevin (4.5) nessas unidades. Vamos assumir que v já é dada em $\mu m/s$, que x é dado em μm e que V_0 e U_0 são dadas em unidades de $k_B T$. A grande mudança será na constante b que, de acordo com (4.2) (lembre-se, estamos desprezando a presença do cilindro), é dada por

$$b = 3\pi\mu a, \quad (4.12)$$

onde a é o diâmetro da partícula. A unidade de μ é

$$[\mu] = \frac{g}{cm \cdot s} = 10^{-7} \frac{kg}{\mu m \cdot s} = 10^{-19} \frac{J \cdot s}{(\mu m)^3} = 24,143211 \frac{k_B T \cdot s}{(\mu m)^3}, \quad (4.13)$$

onde usamos $kg = J \cdot s^2/m^2$ e $J = 2,4143211 \times 10^{20} k_B T$. Daí podemos concluir que a dimensão de b é

$$[b] = \frac{k_B T \cdot s}{(\mu m)^2} \quad (4.14)$$

e nessas unidades b é dado por

$$b = 72,429632\pi\mu a \quad (4.15)$$

com a dado em μm e μ em $g/cm \cdot s$. A partir daqui todas as grandezas serão escritas nesse sistema de unidades.

4.2.3 Atribuindo Valores às Constantes

Uma vez que a expressão para as energias potenciais foram determinadas, o próximo passo é encontrar valores físicos para as constantes envolvidas nessas expressões e na equação (4.5). As constantes que devemos determinar são: o período do potencial periódico, o diâmetro da partícula, o coeficiente de atrito viscoso b , a velocidade constante v do fluido, a constante da energia potencial externa V_0 e a constante da energia potencial de interação U_0 .

Nos experimentos, as partículas coloidais têm dimensão da ordem de micrômetros, por essa razão definimos $d_0 = 1\mu m$. O diâmetro das partículas é escolhido para ser um pouco menor do que o período do potencial externo de forma que duas partículas em poços vizinhos possam ter uma folga para poder flutuar, ver a Figura 4.5. Escolhemos $a = 1.8\mu m$ (lembrando, o período de $\cos(\pi x/d_0)$ é $2\mu m$).

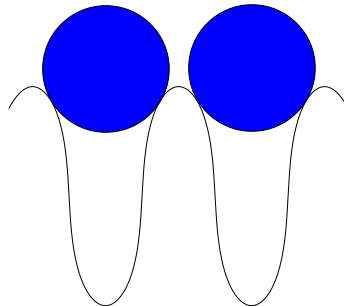


Figura 4.5: Duas esferas em poços adjacentes. Note que cada uma possui uma folga para poder flutuar ao redor do mínimo de potencial.

Se o fluido a ser usado for a água ($\mu_a = 0.01 g/cm \cdot s$), o valor do coeficiente de atrito viscoso está determinado: $b \simeq 4,096 k_B T \cdot s / (\mu m)^2$ (sem o cilindro).

A escolha do valor da velocidade v do fluido está condicionada à escolha da constante do potencial externo V_0 e *vice-versa* pois, se a velocidade do fluido for muito grande as partículas atravessarão o tubo sem sentir o efeito do potencial externo e, caso contrário, se a velocidade do fluido for muito pequena uma partícula nunca conseguirá sair de um poço. Para evitar esse tipo de problemas, devemos escolher v e V_0 adequadamente. Para tal vamos analisar o comportamento do potencial externo efetivo que vamos definir da seguinte forma

$$V_{efe} = -V_0 \cos\left(\pi \frac{x}{d_0}\right) - bvx. \quad (4.16)$$

Esse potencial é obtido somando-se o potencial externo periódico V_{ext} ao potencial (não-conservativo) que origina a força bv nas partículas (essa força surge devido à velocidade constante do fluido). A Figura (4.6) mostra o gráfico de V_{ef} para o caso onde $bvd_0/V_0 = 2$.

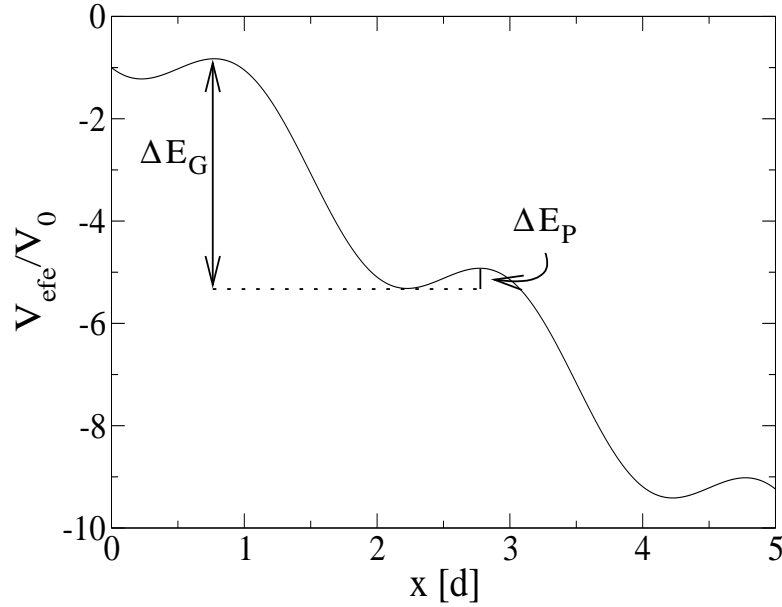


Figura 4.6: Potencial efetivo dado por (4.16) para $bvd_0/V_0 = 2$.

Apesar da forma do gráfico mudar, em relação ao gráfico de $V_{ext} = -V_0 \cos(\pi x/d_0)$, os mínimos do potencial continuam espaçados de $2\mu m$. Mas note que os mínimos e os máximos são deslocados de modo que o primeiro máximo da esquerda de um dado mínimo está mais longe do que o primeiro máximo da direita. Como era de se esperar, é mais fácil para a partícula passar para o poço da direita uma vez que a barreira é menor nessa direção. A energia das flutuações térmicas das partículas é da ordem de $1k_B T$. Queremos evitar que a partícula volte um poço, a maneira de conseguir isso é ter $\Delta E_G \gg k_B T$ e queremos que a partícula tenha chance de vencer a barreira pequena, então $\Delta E_P \sim k_B T$.

Com ΔE_G e ΔE_P dados podemos encontrar v e V_0 da seguinte maneira. Primeiro devemos igualar a derivada de V_{ef} a zero para encontrar os extremos locais

$$\frac{dV_{ef}}{dx} = \frac{\pi V_0}{d_0} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi x_0}{d_0}\right) - bv = 0, \quad (4.17)$$

de onde obtemos

$$x_0 = \frac{d_0}{\pi} \operatorname{sen}^{-1}\left(\frac{bvd_0}{\pi V_0}\right) \quad (4.18)$$

com a condição $bvd_0 \leq \pi V_0$. Note que $0 < (\pi x_0/d_0) < \pi/2$, ou melhor, $0 < x_0 < 0,5\mu m$, pois

$d_0 = 1\mu m$. Como $\sin(\pi - \pi x_0/d_0) = \sin(\pi x_0/d_0)$, os extremos locais de V_{ef} ocorrem em

$$\begin{cases} x_j = 2jd_0 + x_0 & \text{e} \\ y_j = (2j+1)d_0 - x_0 \end{cases} \quad \text{com } j = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots \quad (4.19)$$

Para um dado valor de j temos, $y_{j-1} < x_j < y_j$ e $x_j - y_{j-1} = d_0 + 2x_0 > y_j - x_j = d_0 - 2x_0$. Portanto, de acordo com a Figura 4.6, x_j é um ponto de mínimo, pois para um mínimo local o primeiro máximo da esquerda está mais distante do que o primeiro máximo da direita. Para que x_j fosse um máximo deveríamos ter $x_j - y_{j-1} < y_j - x_j$, o que não é verdade para $x_0 > 0$. Pode-se mostrar que $V_{ef}(y_{j-1})$ e $V_{ef}(y_j)$ são maiores do que $V_{ef}(x_j)$, confirmando o fato de que x_j é um mínimo local mas o argumento acima é mais direto.

Como ΔE_G é a diferença de energia entre um máximo e um mínimo localizado à direita do máximo (máximos e mínimos consecutivos e mais distantes) e como ΔE_P é a diferença de energia entre um máximo e um mínimo localizado à esquerda do máximo (máximos e mínimos consecutivos e mais próximos) podemos escrever:

$$\begin{cases} \Delta E_G = V_{ef}(y_{j-1}) - V_{ef}(x_j) = 2V_0 \cos(\pi x_0/d_0) + bv(d_0 + 2x_0) \\ \Delta E_P = V_{ef}(y_j) - V_{ef}(x_j) = 2V_0 \cos(\pi x_0/d_0) - bv(d_0 - 2x_0) \end{cases} \quad (4.20)$$

ou ainda melhor,

$$\begin{cases} \Delta E_G - \Delta E_P = 2bvd_0 \\ \Delta E_G + \Delta E_P = 4V_0 \cos(\pi x_0/d_0) + 4bv x_0 \end{cases} \quad (4.21)$$

Com os valores de ΔE_G e ΔE_P dados, a primeira equação acima nos dá a velocidade v do fluido e a segunda (que deve ser resolvida numericamente) nos dá a constante da energia potencial externa V_0 . Estudamos a evolução do sistema variando ΔE_G entre os valores $10k_B T$ e $20k_B T$ e ΔE_P nos valores $0,5k_B T$, $1k_B T$, $2k_B T$ e $5k_B T$. Os resultados desses estudos nos levaram a concluir que $\Delta E_G = 20k_B T$ e $\Delta E_P = 2k_B T$ são bons valores para serem usados, uma vez que têm um tempo de simulação não muito grande e respeitam a requerida correspondência com o TASEP em rede. Com os valores acima para ΔE_G e ΔE_P obtemos

$$\begin{cases} v = 2,1974 \mu m/s \\ V_0 = 4,5680 k_B T \\ x_0 = 0,2158 \mu m. \end{cases} \quad (4.22)$$

A constante U_0 deve ser bem maior do que V_0 de modo a evitar que as partículas fiquem invadindo umas às outras (quando duas esferas se chocam há uma grande repulsão entre as duas). Essa constante também foi escolhida experimentando alguns valores. Ela não pode ser grande demais senão vamos ter problemas na hora da integração numérica como, por exemplo,

partículas dando saltos gigantescos e ultrapassando outras partículas. O valor que vamos usar é $U_0 = 40k_B T$ que satisfaz os requerimentos de não ser muito grande e de evitar que as partículas ocupem o mesmo mínimo de potencial.

4.2.4 Discretizando e Integrando a Equação de Langevin

Vimos na seção 2.1.4 como realizar a integração numérica da equação de Langevin. Com base nessa seção podemos escrever a equação (4.5) na forma discretizada da seguinte maneira:

$$x_i^{n+1} = x_i^n + \tau \left\{ v - \frac{1}{b} \frac{\partial V_{ext}(x_i^n)}{\partial x_i^n} - \frac{1}{b} \frac{\partial}{\partial x_i^n} \left[V_{int} \left(\frac{x_{i,i-1}^n}{a} \right) + V_{int} \left(\frac{x_{i,i+1}^n}{a} \right) \right] \right\} + \frac{m}{b} \sqrt{q\tau} \xi^n \quad (4.23)$$

onde x_i^n é a posição da partícula i no n -ésimo passo de integração, $x_{i,j}^n = x_j^n - x_i^n$, τ incremento no tempo em cada passo de integração e ξ^n é um número aleatório gaussiano com média zero e variância $\sigma^2 = 1$. Quando usamos (4.4) para o valor de q , temos

$$\frac{m}{b} \sqrt{q} = \sqrt{\frac{2}{b}},$$

uma vez $k_B T = 1$ no nosso sistema de unidades. Substituindo a energia potencial externa dada por (4.7) e a energia potencial de interação dada por (4.10) obtemos:

$$x_i^{n+1} = x_i^n + v_1 - V_1 \sin(\pi x_i^n) + U_1 \left[\left(\frac{a}{x_i^n - x_{i-1}^n} \right)^{13} - \left(\frac{a}{x_{i+1}^n - x_i^n} \right)^{13} \right] + q_1 \xi^n \quad (4.24)$$

onde $a = 1,8\mu m$ é o diâmetro das partículas e

$$\begin{aligned} v_1 &\equiv v\tau \\ V_1 &\equiv \frac{\pi V_0 \tau}{b} \\ U_1 &\equiv \frac{12U_0 \tau}{ab} \\ q_1 &\equiv \sqrt{\frac{2\tau}{b}}. \end{aligned} \quad (4.25)$$

A equação (4.24) com as constantes dadas por (4.25) resume numericamente tudo o que discutimos para o modelo do TASEP em espaço contínuo. Ela deve ser integrada numericamente para cada partícula para obtermos a evolução temporal do sistema. A seguir entramos nos detalhes técnicos envolvidos nessa etapa.

Com as constantes v , V_0 , U_0 , a e b conhecidas só falta especificar o passo de integração

τ para que v_1 , V_1 , U_1 e q_1 sejam determinadas e (4.24) possa ser integrada. O valor de τ deve ser escolhido o maior possível para diminuir o tempo de simulação. Quanto menor for τ mais importante se torna o termo aleatório e, portanto, menor será o erro cometido devido a aproximações na integração numérica. A maneira de escolher τ é começar com um valor grande e evoluir o sistema para obter o valor médio de alguma grandeza (por exemplo, medir a velocidade média quando apenas uma partícula está presente no sistema), depois diminuir τ até que as diferenças nos valores médios estejam dentro das incertezas. A partir desse ponto diminuir mais o valor de τ só aumentará mais o tempo de simulação. Estudos desse tipo nos levaram a usar $\tau = 5 \times 10^{-5} s$ em nossas simulações.

A Figura (4.7) mostra a trajetória de uma partícula sozinha no sistema. O gráfico mostra os degraus típicos desse tipo de sistema que surgem devido ao tempo que a partícula fica presa no mínimo do potencial. É lógico que para um outro ensaio a curva será diferente, mas as características serão as mesmas.

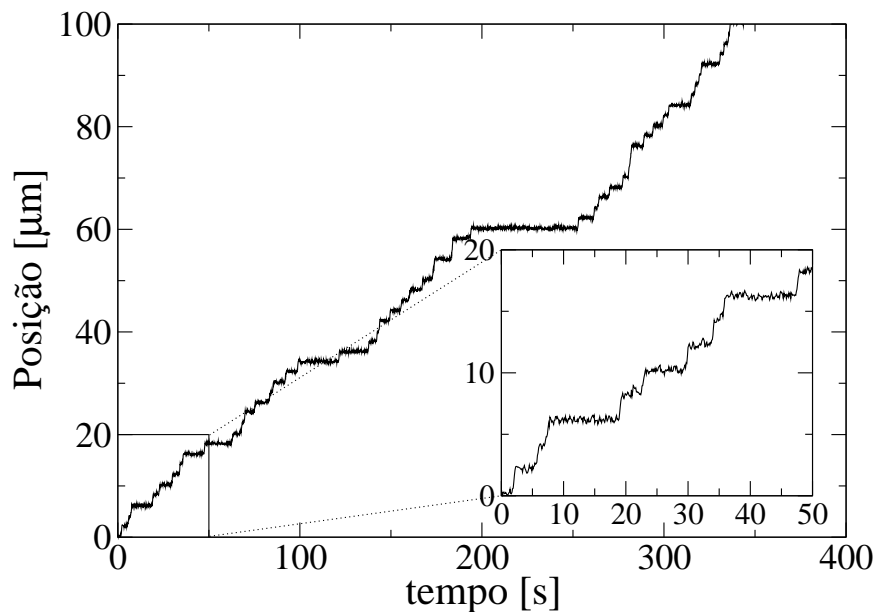


Figura 4.7: Trajetória de uma partícula no sistema em função do tempo com uma ampliação na região inicial.

Ainda com apenas uma partícula no sistema é importante medirmos o tempo de transição médio. Esse tempo corresponde aproximadamente ao tempo que a partícula leva para passar de um poço para outro consecutivo. O tempo de transição médio é dado pela divisão do tempo médio que a partícula leva para atravessar um certo número L de poços pelo número L de poços. Medimos o seguinte valor para o tempo de transição médio:

$$T_{LA} = 6,5380(9)s \quad (4.26)$$

com o subscrito LA indicando que o tempo de transição médio foi obtido usando a integração numérica da equação de Langevin (para diferenciar do tempo de transição médio que será obtido pelo método de Monte Carlo). Essa grandeza é importante porque as taxas de inserção e remoção são dadas em unidades de taxa de transição média entre poços consecutivos que é o inverso de T_{LA} . Isto quer dizer que uma taxa de 0.1 significa que $0.1/T_{LA}$ partículas são inseridas por segundo. Assim, em cada passo de integração, a probabilidade de inserção de partículas é $\alpha\tau/T_{LA}$ e a probabilidade de remoção é $\beta\tau/T_{LA}$.

Agora fica fácil montar um algoritmo para evoluir o sistema no tempo. Devemos especificar o tamanho do sistema, ou seja, quantos poços de potencial existem. Um poço de potencial é definido como a região entre dois máximos consecutivos. Em cada passo de integração, que corresponde a um tempo τ , integramos a equação (4.24) para cada partícula presente no sistema. Ainda em cada passo de integração tentamos inserir uma partícula no primeiro poço com probabilidade $\alpha\tau/T_{LA}$ se ele estiver vazio e remover uma partícula do último poço com probabilidade $\beta\tau/T_{LA}$ se ele estiver ocupado.

4.3 Simulação de Monte Carlo Dinâmico

Uma grande desvantagem da integração numérica da equação de Langevin é o custo computacional. Quando aumentamos o tamanho do sistema a quantidade de equações da forma (4.24) a serem integradas aumenta e o tempo de simulação também. Assim, a integração numérica da equação de Langevin está limitada a sistemas pequenos. Com o intuito de estudar sistemas de tamanhos maiores, desenvolvemos um algoritmo de Monte Carlo dinâmico para o TASEP em espaço contínuo. A grande vantagem do método de Monte Carlo é o fato de que a evolução do sistema é realizada de acordo com os pesos das configurações do sistema. Configurações mais prováveis são visitadas mais vezes. Isso diminui consideravelmente o tempo de simulação.

A aplicação do método de Monte Carlo ao TASEP em rede é bem direta, uma vez que temos a expressão para a energia total do sistema:

$$E = -V_0 \cos(\pi x) - \alpha vx - V_{int}(x), \quad (4.27)$$

onde V_{int} é dada por (4.10). Note que incluímos na energia total do sistema o termo $-\alpha vx$ que gera a força constante que atua sobre as partículas devido à velocidade constante do fluido.

Com essa expressão para a energia podemos aplicar o algoritmo de Metrópolis que consiste em:

1. sortear uma nova configuração e calcular $\Delta E = E' - E$, onde E' é a energia da nova configuração e E a energia da configuração atual;
2. aceitar a nova configuração com probabilidade $\min(1, e^{-\Delta E})$;
3. repetir os passos 1 e 2 o quanto for necessário.

Existem muitos detalhes envolvidos na escolha da nova configuração do sistema no algoritmo de Metrópolis. Primeiramente devemos escolher aleatoriamente uma partícula do sistema para ser movida. Depois devemos sortear um deslocamento para a partícula escolhida para finalmente calcular E' . Usamos uma distribuição de probabilidade uniforme para a escolha da partícula e uma gaussiana para o deslocamento. A largura da gaussiana foi escolhida como sendo 10% do tamanho de um poço, ou seja, $\sigma = 0,2\mu m$. Quanto maior for o valor de σ mais rápido será a simulação, então é conveniente escolher um valor grande de σ . Em compensação, se σ for muito grande, a probabilidade de um partícula saltar direto de um poço para outro não é desprezível, e queremos evitar que isso aconteça. Uma escolha que satisfaz esses requisitos é $\sigma = 0,2\mu m$.

Cada vez que os passos 1 e 2 acima são realizados dizemos que foi dado 1 passo de Monte Carlo. Queremos encontrar a correspondência entre um passo de Monte Carlo e o tempo usado na equação de Langevin. Para tal igualamos o tempo médio de transição de Monte Carlo T_{MC} ao tempo médio de transição de Langevin T_{LA} . O tempo médio de transição de Monte Carlo é medido da mesma maneira que o tempo médio de transição de Langevin e o resultado é

$$T_{MC} = 120,917(1) \quad (4.28)$$

ou seja, é preciso um número médio de 120,917 passos de Monte Carlo para que a partícula mude de um poço para outro. Assim, o tempo correspondente T_0 a um passo de Monte Carlo é dado por

$$T_0 = \frac{T_{LA}}{T_{MC}} = 5,4070(8) \times 10^{-2}s, \quad (4.29)$$

Ou seja, quando damos um passo de Monte Carlo, o sistema evolui no tempo de $5,4070(8) \times 10^{-2}s$, enquanto que num passo de integração da equação de Langevin o sistema evolui no tempo de $5 \times 10^{-5}s$. Aqui já dá para ver qual é a vantagem de se usar o método de Monte Carlo ao invés da integração da equação de Langevin. Note que esse tempo é a grandeza física que entra na definição do modelo, vamos chamá-lo de tempo físico. O tempo real que a simulação demora depende do tamanho do sistema. Embora possamos estudar sistemas de tamanho diferentes durante um mesmo intervalo de tempo físico, o tempo real será maior para os sistema maiores.

A inserção e a remoção de partículas é feita como no caso de Langevin. Se o primeiro poço estiver vazio, inserimos uma partícula com probabilidade α/T_{MC} e, se o último poço estiver ocupado, removemos a partícula com probabilidade β/T_{MC} . Note que as probabilidades acima são dadas em unidades de $1/T_{MC}$ e não de $1/T_{LA}$. Isso ocorre porque o incremento no tempo em um passo de Monte Carlo é T_0 e as taxas de inserção e remoção são α/T_{LA} e β/T_{LA} , respectivamente. Assim, as probabilidades de inserção e remoção em um passo de Monte Carlo são, respectivamente, $T_0\alpha/T_{LA} = \alpha/T_{MC}$ e $T_0\beta/T_{LA} = \beta/T_{MC}$.

Em um passo de Monte Carlo podem ocorrer um dos três eventos: inserção se o primeiro poço estiver vazio, remoção se o último poço estiver ocupado ou uma tentativa de mover uma das partículas. Assim, um passo de Monte Carlo corresponde na verdade a

$$T_c = \frac{T_0}{\alpha(1 - \sigma_1) + \beta\sigma_L + N}, \quad (4.30)$$

onde σ_1 (σ_L) é um caso o poço 1 (L) esteja ocupado e zero caso esteja vazio e N é o número de partículas no sistema.

As taxas α e β são os parâmetros de controle do modelo, é variando essas taxas que obtemos o diagrama de fase. Uma mudança de fase ocorre quando uma mudança no comportamento da densidade ocorre. Por essa razão a densidade é o parâmetro de ordem do TASEP. Uma outra grandeza importante para esse modelo é a corrente de partículas. A corrente também apresenta comportamentos diferentes em fases diferentes. Como corrente e densidade são grandezas importantes para o modelo em rede, também devem ser para o modelo em espaço contínuo. Assim, corrente e densidade são as grandezas que mais estamos interessados em obter os valores médios. É importante ressaltar que os valores médios devem ser calculados para sistemas estacionários, ou seja, sistemas cujas grandezas médias não dependem do tempo e que evoluíram tempo suficiente para esquecer a condição inicial.

5 Resultados

O sistema de partículas brownianas interagentes é evoluído no tempo usando a integração numérica da equação de Langevin e o método de Monte Carlo dinâmico. Nesse capítulo, apresentamos, separadamente, os resultados obtidos para cada uma dessas técnicas.

5.1 Integração da Equação de Langevin

A integração numérica da equação de Langevin é demorada computacionalmente e, por essa razão, nos permitiu estudar apenas um sistema com $L = 100$ poços. Como a largura de um poço é $2\mu m$, o comprimento desse sistema é de $200\mu m$. Nesse sistema, fizemos medida da densidade média de partículas em cada poço, uma das grandezas mais importantes na determinação do diagrama de fase do TASEP. A densidade no poço é igual à ocupação média do poço e é dada por

$$\rho(i) = \frac{N_i}{N} \quad (5.1)$$

onde N é o número de vezes que uma medida da densidade foi realizada e N_i é o número de vezes que o poço i estava ocupado durante as N medidas. Logicamente, as fronteiras dos poços são definidas como os pontos onde ocorrem os máximos do potencial efetivo, pois entre dois máximos consecutivos existe sempre um mínimo de potencial, ver Figura 4.6. Assim, numa medida da densidade, uma partícula está dentro do poço i se ela estiver entre os dois máximos consecutivos desse poço. A unidade física da densidade de partículas é partícula por micrômetro. Aqui vamos definir a seguinte unidade para a densidade de partículas: p/d , ou seja, partícula p por largura $d = 2\mu m$ de um poço.

O gráfico da densidade média em função do poço nos dá o perfil de densidade. A Figura (5.1) mostra perfis de densidade obtidos para β fixo em 0,2 e 0,4. Na Figura 5.1(a) o valor de β é mantido fixo em 0,2 e α é variado de 0,1 a 0,5 com incremento de 0,1. (Lembre-se, as taxas de inserção e remoção são dadas em unidades da taxa média de transição de um poço, $1/T_{LA}$.) O perfil para $\alpha = 0,1$ e $\beta = 0,2$ nos mostra que a densidade do sistema é baixa e pró-

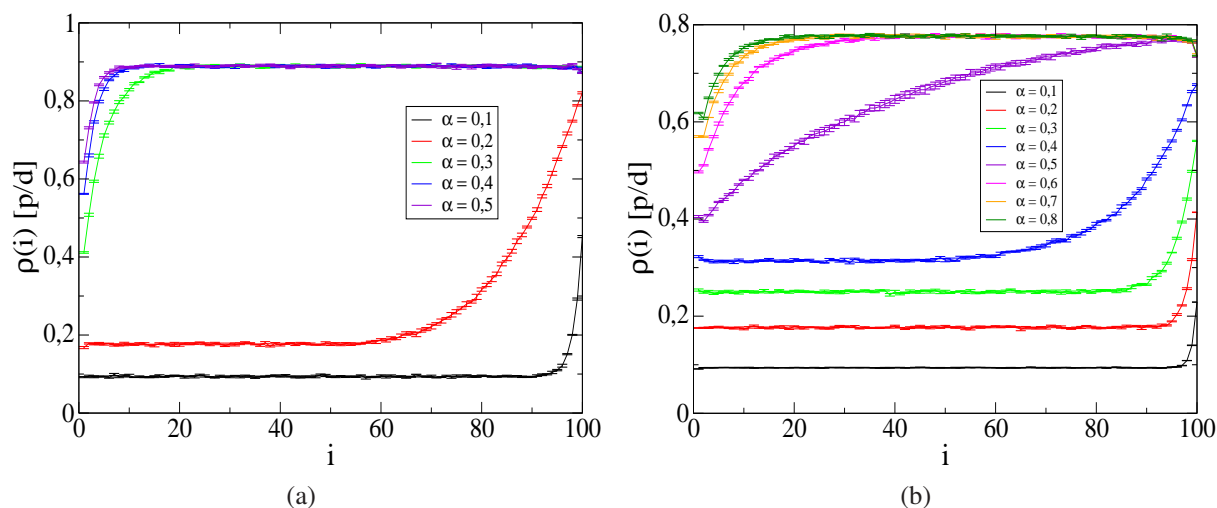


Figura 5.1: Perfis de densidade para (a) $\beta = 0,2$ e (b) $\beta = 0,4$ e diferentes valores de α , onde $1 \leq i \leq L$ é o índice de poço.

xima ao valor da densidade no primeiro poço. Para densidade baixa, $\rho \ll 1$, é esperado que a densidade no primeiro poço tenda a ser igual ao valor de α , por causa da inserção de partículas nesse poço com taxa α e remoção com taxa $1 - \rho \sim 1$. Pelo mesmo motivo, a densidade no último poço se aproxima de $1 - \beta$ no limite $\rho \rightarrow 1$. Para $\alpha = 0,2$, o perfil começa a ser mais influenciado pela extremidade direita do sistema, onde ocorre a remoção de partículas. Para $\alpha = 0,3$, vemos que a densidade do sistema é alta e bastante próxima da densidade no último poço. Para valores de α maiores do que 0,3 o perfil de densidade não muda muito exceto para os poços próximos à extremidade esquerda do sistema. Isso indica que há uma transição de fase quando $\beta = 0,2$ e passamos de $\alpha = 0,2$ para $\alpha = 0,3$. Vamos chamar a fase para $\alpha < 0,2$ de fase de densidade baixa e a fase para $\alpha > 0,3$ de fase de densidade alta, em analogia com o modelo em rede.

Os mesmos aspectos discutidos para o caso de $\beta = 0,2$ podem ser observados em $\beta = 0,4$, Figura 5.1(b). Mas existem duas diferenças, a transição ocorre num ponto diferente, a saber entre $\alpha = 0,4$ e $\alpha = 0,5$, e o valor da densidade após a transição é menor para o caso $\beta = 0,4$. Isso indica que a densidade na fase de alta densidade é dependente apenas de β . Na fase de densidade baixa, a densidade é função apenas de α , o que pode ser concluído comparando o perfil para $\alpha = 0,1$ e $\beta = 0,2$ com o perfil para $\alpha = 0,1$ e $\beta = 0,4$. Essas conclusões estão em acordo com o que é esperado do modelo em rede.

Concluindo, observamos uma transição de fase descontínua, no sentido de que há um salto na densidade do sistema (o parâmetro de ordem), quando β é mantido fixo em 0,2 ou 0,4 e variamos α . Desprezando as regiões da borda do sistema, a densidade do sistema depende apenas de α na fase de densidade baixa e apenas de β na fase densidade alta. Essa é a primeira

indicação de que o modelo apresenta uma transição de fase que, de acordo com a discussão acima, é análoga à transição descontínua que ocorre no TASEP em rede.

A transição de fase não é só acompanhada por uma mudança na densidade do sistema, é importante observar que a forma típica do perfil de densidade também é diferente em cada fase. Na fase de densidade baixa, o perfil é plano e apresenta uma inclinação abruptamente crescente e positiva na extremidade direita, enquanto que, na fase de densidade alta, o comportamento se inverte, a inclinação é positiva mas decrescente quando se afasta da extremidade esquerda.

Na Figura (5.1), observamos que apenas a extremidade esquerda dos perfis de densidade na fase de densidade alta é visivelmente modificada quando modificamos α . O mesmo acontece se comparamos perfis de densidade na fase de densidade baixa para α fixo: somente a extremidade direita do perfil sofrerá modificações visíveis se mudarmos o valor de β . Essa modificação influi pouco no valor da densidade total do sistema. Isso é devido ao efeito de tamanho finito: como o sistema possui tamanho finito, as bordas influenciam no perfil de densidade fazendo com que o perfil na fase de densidade alta (baixa) dependa ligeiramente de α (β), enquanto que num sistema infinito tal dependência não existiria. Assim, a maneira de diminuir os efeitos de borda é aumentar o tamanho do sistema.

Para eliminar parcialmente os efeitos de borda em sistemas finitos e possibilitar a determinação da transição de fase, é conveniente definir a densidade ρ do sistema como sendo uma média sobre poços longe das extremidades. Escolhemos fazer essa média sobre 10% dos poços mais internos, que, no caso de $L = 100$, corresponde aos poços no intervalo $[45, 55]$. A Figura 5.2 mostra o gráfico da densidade do sistema em função de α para os perfis apresentados na Figura 5.1.

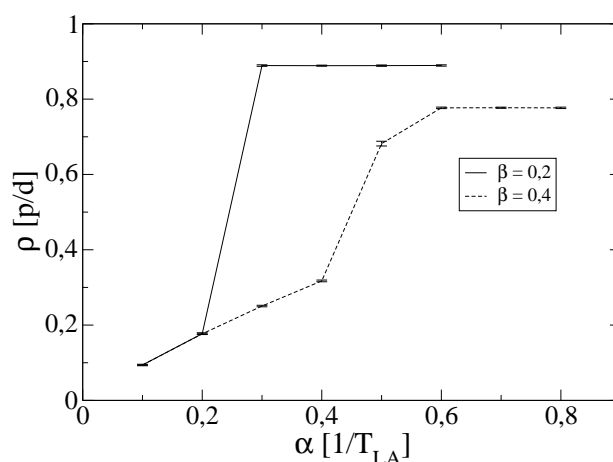


Figura 5.2: Densidade do sistema para $\beta = 0,2$ e $\beta = 0,4$.

Com o gráfico da figura 5.2 fica mais fácil observar as características discutidas anteriormente para a transição de fase. Vemos nitidamente um salto na densidade ρ do sistema. Para $\beta = 0,2$ o salto ocorre entre $\alpha = 0,2$ e $\alpha = 0,3$, enquanto que para $\beta = 0,4$ o salto ocorre entre $\alpha = 0,4$ e $\alpha = 0,5$. Na fase de densidade baixa a curva da densidade é a mesma para $\beta = 0,2$ e para $\beta = 0,4$. Portanto, a densidade é função apenas de α e independente do valor de β na fase de densidade baixa e, na fase de densidade alta, depende apenas de β .

Algo novo acontece quando fixamos $\beta = 0,8$, veja a Figura (5.3(a)). Para valores baixos de α estamos na fase de densidade baixa (como no caso de $\beta = 0,2$ e $\beta = 0,4$). Mas quando aumentamos o valor de α , observamos uma mudança na forma dos perfis de densidade. Os perfis têm agora uma inclinação negativa e crescente na extremidade esquerda e uma inclinação negativa decrescente na extremidade direita. Mas, tal mudança ocorre sem a presença de um salto no valor da densidade, o que indica a possibilidade de uma transição contínua. Os perfis parecem tender a um perfil cuja forma é independente de α .

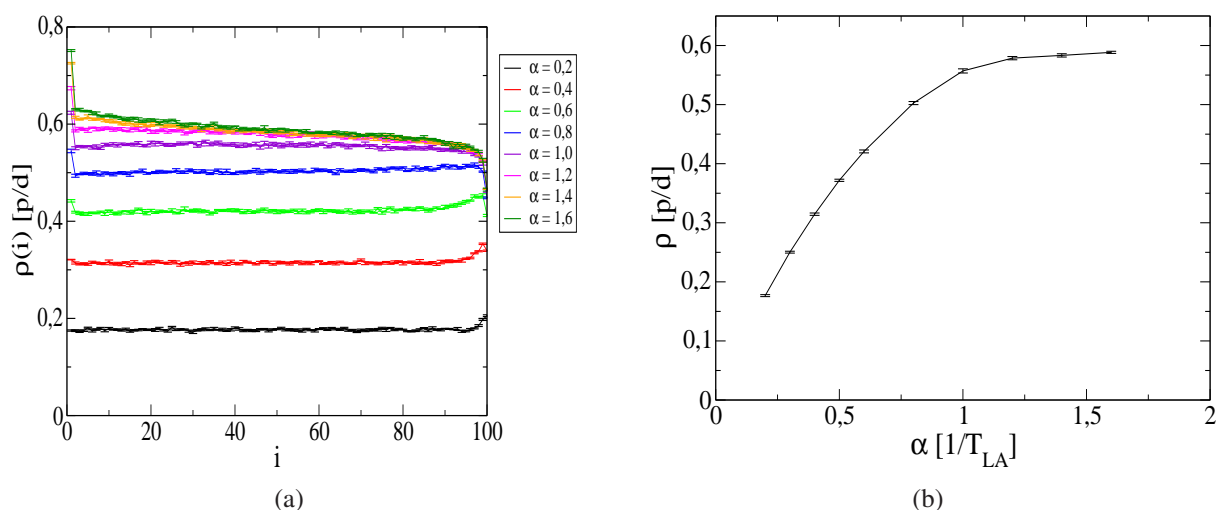


Figura 5.3: (a) Perfil de densidade e (b) densidade do sistema para $\beta = 0,8$.

A Figura 5.3(b) mostra a densidade do sistema (calculada como a média em 10% dos poços mais internos) para o caso $\beta = 0,8$. A densidade atinge o valor de saturação sem a ocorrência de um salto no seu valor, o que corrobora as suspeitas de que a transição de fase, no caso $\beta = 0,8$, é contínua. Essas características nos levam a supor que essa transição é análoga a transição contínua que ocorre no TASEP em rede da fase de densidade baixa para a fase de corrente máxima.

Para o caso $\beta = 0,8$ existe a dúvida se a transição é realmente contínua. Para afirmar a continuidade ou não da densidade na transição, precisamos de mais pontos na região de transição. Além disso, no intuito de determinar o diagrama de fase do TASEP em espaço contínuo,

precisamos estudar outros valores de β e α , de preferência, em sistemas de tamanhos maiores, para diminuir os efeitos de borda. Levando em consideração o fato de que os resultados anteriores foram bem demorados para se conseguir usando a simulação de Langevin, desenvolvemos um algoritmo de Monte Carlo dinâmico para o modelo no intuito de diminuir o tempo de simulação. Os resultados, mostrados na próxima seção, definem a transição para o caso $\beta = 0,8$ e permitem a determinação do diagrama de fase.

5.2 Simulação de Monte Carlo

O método de Monte Carlo reduz drasticamente o tempo total das simulações em comparação com a integração da equação de Langevin. Só para se ter uma idéia, para obter o perfil indicado na Figura 5.4, com $\alpha = 0,3$ e $\beta = 0,4$, a integração de Langevin demora 45 horas (quase dois dias), enquanto que a simulação de Monte Carlo leva 3 minutos. Para o caso $\alpha = 0,8$ e $\beta = 0,4$ a diferença é ainda maior: 258 horas para Langevin e 9 minutos para Monte Carlo. O tempo simulação aumenta quando passamos de $\alpha = 0,2$ para $\alpha = 0,3$ porque o número de partículas, cujas posições devem ser integradas, é maior no segundo caso (a densidade do sistema aumenta se aumentamos a taxa de inserção de partículas).

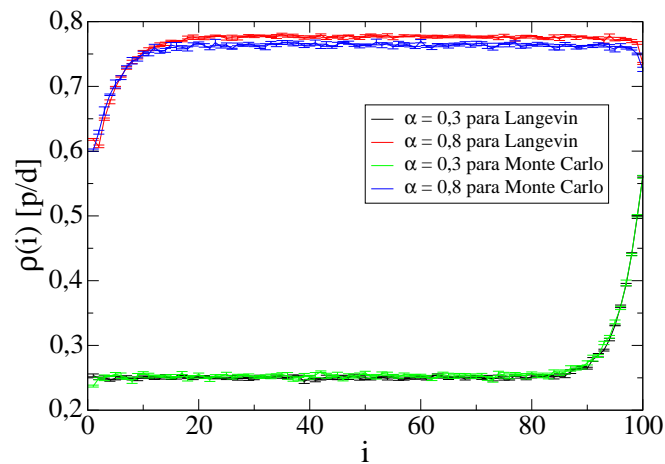


Figura 5.4: Comparação entre perfis para $\beta = 0,4$ obtidos por integração da equação de Langevin e pela simulação de Monte Carlo.

A figura 5.4 demonstra também a validade da simulação de Monte Carlo quando comparada com a integração de Langevin. Os perfis de Langevin e Monte Carlo, apesar de não serem idênticos, são semelhantes. Qualitativamente, ambos descrevem a transição descontínua que ocorre para valores pequenos de α e β , Figura 5.4, e a transição contínua que ocorre para valores maiores das taxas α e β , como vamos ver mais adiante. Quantitativamente, os perfis de

Langevin são diferentes dos de Monte Carlo quando comparamos perfis para os mesmos valores de α e β . Apesar dos nossos esforços em encontrar o tempo em Langevin correspondente a um passo de Monte Carlo (equação 4.29), isso não foi suficiente para garantir que as taxas α e β de Monte Carlo fossem as mesmas das taxas de Langevin. Deve haver um fator de conversão entre as taxas de Langevin e as taxas de Monte Carlo, o qual só é de interesse para uma comparação entre os dois métodos de simulação e irrelevante para o resultados que seguem. Esse fator deve ser bem perto a um, uma vez que, no caso $\alpha = 0,8$ e $\beta = 0,4$, a diferença da densidade ρ do sistema obtida via Monte Carlo para a densidade obtida via Langevin é cerca de 1,6%, o que é bem aceitável. Possivelmente, essa diferença acontece devido aos saltos que as partículas dão em cada passo de Monte Carlo. Em algum momento, próximo a um máximo do potencial, a partícula pode dar um salto suficiente para vencer uma pequena barreira de potencial e, assim, chegar mais rápido ao último poço. Com o último poço sendo ocupado mais rápido, a partícula é removida mais rápido e a densidade diminui, pois isso é equivalente a um aumento da taxa de remoção. Isso justifica o fato da densidade em Monte Carlo ser um pouco menor do que a densidade em Langevin para mesmos valores de α e β .

Resultados para perfis de densidade são análogos aos obtidos usando a integração da equação de Langevin, como pode ser visto na Figura 5.4. Nos concentraremos em mostrar resultados para a densidade do sistema (a média de 10% dos poços mais internos) e para a corrente de partículas. A corrente de partículas é medida simplesmente, contando-se o número médio de partículas que são removidas do sistema durante um dado intervalo de tempo e dividindo esse número pelo intervalo de tempo. Conseqüentemente, a unidade de corrente é partículas por segundo que vamos abreviar para p/s .

Antes de mostrarmos os resultados para a densidade e corrente no sistema, vamos discutir um pouco a estacionaridade do sistema. Para determinar o tempo necessário para o sistema chegar ao estado estacionário, medimos a densidade de partículas no sistema em função do tempo. Um gráfico dessas medidas é mostrado na Figura 5.5.

O gráfico na Figura 5.5 é importante porque nos permite determinar o tempo de relaxação do sistema para o estado estacionário e também porque mostra que esse tempo não é o mesmo para todos os valores de β e α . Note que o tempo de relaxação de $\alpha = 0,3$ é maior do que o tempo de relaxação para $\alpha = 0,1$. Além disso, o tempo de relaxação para valores de β e α próximos da transição de fase é ligeiramente maior do que o tempo para valores longe da transição. Note também que o número de partículas oscila bem mais na região de parâmetros próximos à transição de fase (que ocorre aproximadamente para $\alpha = 0,21$ no caso de $\beta = 0,2$). Isso ocorre porque o sistema tende a oscilar entre a fase de densidade baixa e a fase de densidade

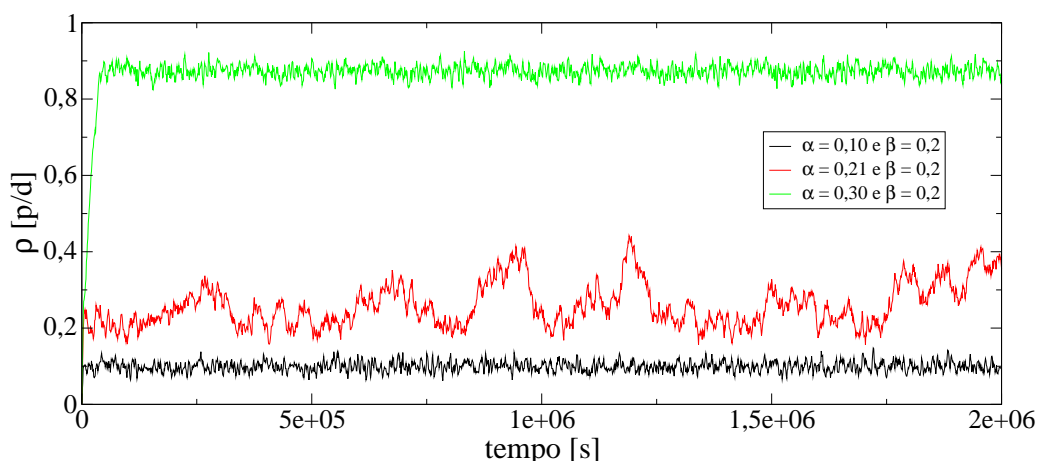


Figura 5.5: Densidade de partículas em função do tempo para $\beta = 0,2$ e $\alpha = 0,1; 0,21$ e $0,3$ com $L = 200$.

alta na transição de fase descontínua. Vamos retornar a essa discussão quando mostrarmos resultados para a variância da densidade em função das taxas α e β .

A simulação de Monte Carlo nos possibilitou estudar sistemas de tamanhos maiores em muito menos tempo computacional e com uma estatística muito melhor (ou seja, incertezas menores) do que a integração de Langevin. Estudamos sistemas com os tamanhos $L = 100, 200$ e 500 poços. Isso é vantajoso porque, mantendo os valores de α e de β fixos, podemos obter uma comparação entre perfis de densidade para diferentes tamanhos do sistema, como mostra a Figura (5.6).

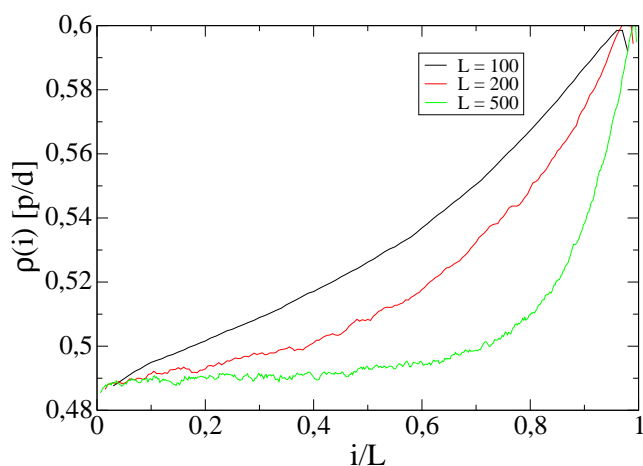


Figura 5.6: Perfis de densidade com $\alpha = 0,7$ e $\beta = 0,6$ para os diferentes tamanhos de sistema $L = 100, 200$ e 500 . O eixo horizontal foi normalizado e $1 < i < L$ é o índice de poço.

Observe que os efeitos de borda são diminuídos quando aumentamos o tamanho L do sistema. O valor escolhido para α e β não foi aleatório. Escolhemos mostrar o perfil para esses

valores porque para $L = 100$ a fase não está bem definida, mas quando aumentamos o tamanho do sistema, os efeitos de borda diminuem e podemos afirmar que num sistema de tamanho infinito o sistema estará na fase de densidade baixa. O efeito causado pelo aumento do tamanho do sistema pode ser melhor visualizado quando comparamos o gráfico da densidade do sistema em função de α com β fixo (ou *vice e versa*) para cada tamanho estudado. Na Figura (5.7) fixamos $\beta = 0,4$ e obtivemos a densidade do sistema em função de α para os três tamanhos estudados. Note que a inclinação da densidade na região de transição aumenta quando aumentamos o tamanho do sistema e, portanto, a transição fica mais nítida.

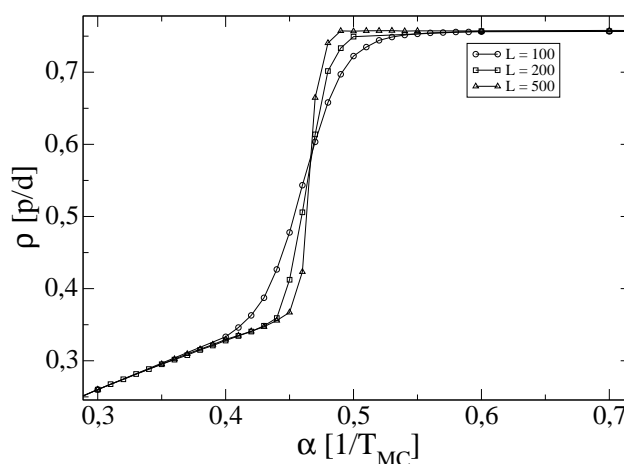


Figura 5.7: Densidade do sistema em função de α com β fixo em 0,4 para os tamanhos $L = 100$, $L = 200$ e $L = 500$.

Os resultados que vamos mostrar a seguir são os principais resultados que obtivemos, pois é através deles que vamos encontrar o diagrama de fase do TASEP em espaço contínuo. Escolhemos estudar mais intensivamente o sistema com $L = 200$ poços uma vez que é bastante grande para reduzir apreciavelmente o efeito de borda e suficientemente pequeno para que a simulação não seja demorada. A Figura (5.8) mostra o gráfico da densidade ρ do sistema e da corrente J de partículas em função de β com α mantido fixo. Vale lembrar que a densidade do sistema é definida como a média da ocupação nos poços no intervalo $[90, 110]$ para o caso $L = 200$.

Vamos nos concentrar no gráfico da densidade para $\alpha = 0,1$, ver Figura (5.8(a)). Começando de valores baixos de β a densidade é alta ($\beta < \alpha$), ou seja estamos na fase de densidade alta. Para valores pequenos de β a densidade do sistema diminui linearmente com β até que, ao redor de $\beta = 0,1$, a densidade sofre um salto abrupto, passando para um valor bem menor do que os valores iniciais. A partir desse ponto por mais que aumentemos o valor de β a densidade do sistema não muda, estamos na fase de densidade baixa onde a densidade do sistema é independente do valor de β .

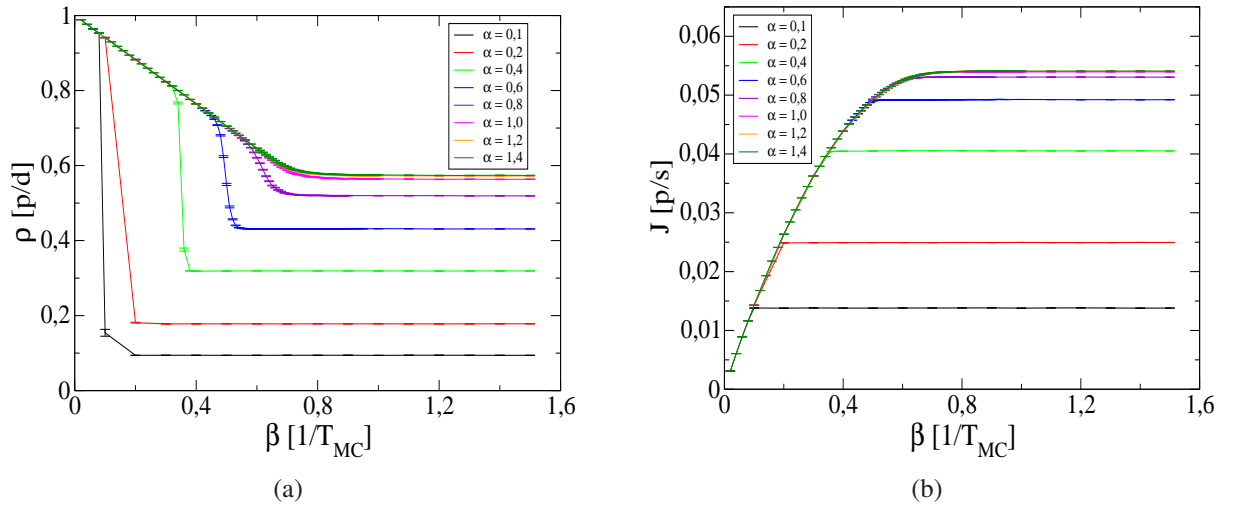


Figura 5.8: Gráficos (a) da densidade e (b) da corrente do sistema de $L=200$ poços em função de β com α fixo.

Observemos agora a curva da densidade para o caso onde $\alpha = 0,2$. Em valores pequenos de β a curva da densidade em função de β é exatamente a mesma para o caso de $\alpha = 0,1$. Mas para $\beta > 0,2$ a densidade não muda mais com β e o valor de saturação da densidade é diferente do valor de saturação para $\alpha = 0,1$. Podemos observar esse mesmo tipo de transição também para $\alpha = 0,4$ e $0,6$, sendo que as diferenças entre essas transições estão no valor de β onde a transição ocorre e no valor da densidade na fase de densidade baixa. É importante notar que a densidade na fase de densidade alta depende apenas de β e que na fase de densidade baixa depende apenas de α .

As curvas da corrente de partículas apresentam o mesmo comportamento das curvas de densidade, apesar de não explicitarem a descontinuidade das transições. Na fase de densidade alta, a curva da corrente é única para todos os valores de α e na fase de densidade baixa, o valor de saturação da corrente independe de β mas depende de α . Qualitativamente, esse comportamento da densidade e da corrente é igual ao que ocorre na transição descontínua do modelo em rede: se fixamos um valor de $\alpha < 0,5$, ocorre uma transição descontínua em $\beta = \alpha$ da fase de densidade alta ($\beta < \alpha$), onde $\rho = 1 - \beta$ e $J = \beta(1 - \beta)$, para a fase de densidade baixa ($\beta > \alpha$), onde $\rho = \alpha$ e $J = \alpha(1 - \alpha)$.

Para valores superiores a $\alpha = 1,0$, a curva da densidade sofre uma transição, sem descontinuidade, de uma dependência linear em β para uma curva constante. Essa seria a transição contínua análoga a que ocorre no TASEP em rede. É interessante notar que as curvas da densidade e da corrente para $\alpha = 1,2$ são praticamente as mesmas para $\alpha = 1,4$. No modelo em rede, quando α é fixo num valor maior que $0,5$, ocorre uma transição, sempre em $\beta = 0,5$, da fase de densidade alta ($\beta < 0,5$) para a fase de corrente máxima ($\beta < 0,5$), onde $\rho = 1/2$ e $J = 1/4$.

Seguindo a analogia com o modelo em rede, chamamos a fase onde a densidade é constante (independente de α e β) de fase de corrente máxima. Nessa, como no modelo em rede, a corrente atinge o seu máximo, como pode ser verificado observando os gráficos de $\alpha = 1,2$ e $1,4$ na Figura 5.8(b). Como as curvas da densidade e da corrente são as mesmas para todo $\alpha > 1,0$, o ponto no eixo β onde a transição contínua ocorre é sempre o mesmo.

Observando a Figura (5.8(a)), vemos que a transição descontínua vai ficando menos definida quando aproximamos da região de transição contínua. No limite em que o salto na densidade tende para zero fica cada vez mais difícil distinguir a transição descontínua da contínua. Podemos ver claramente a ambigüidade na definição da transição para os casos $\alpha = 0,8$ e $\alpha = 1,0$. Nesses casos, os valores de saturação da densidade e da corrente ainda não atingiram os valores da fase de corrente máxima (para o caso $\alpha = 1,0$ devemos reduzir a escala do gráfico na Figura 5.8(b) para poder ver que a corrente ainda não atingiu o valor máximo), o que indica a possibilidade de uma transição descontínua. Mas parece não haver uma descontinuidade na curva da densidade, podendo a transição ser também contínua. Para resolver essa ambigüidade, supondo que é devida ao tamanho finito do sistema, calculamos a corrente de saturação J_{sat} e a densidade de saturação ρ_{sat} (ou seja, o valor da corrente e da densidade na fase de corrente máxima) fixando α em $0,8$ e em $1,0$ para os seguintes tamanhos: $L = 100$, $L = 200$ e $L = 500$, como mostra a Tabela 5.1.

| L | $\alpha = 0,8$ | | $\alpha = 1,0$ | |
|-----|--------------------|----------------------------|--------------------|----------------------------|
| | $\rho_{sat} [p/d]$ | $J_{sat} [p/s]$ | $\rho_{sat} [p/d]$ | $J_{sat} [p/s]$ |
| 100 | 0,5162(2) | $5,3064(5) \times 10^{-2}$ | 0,5566(2) | $5,4092(4) \times 10^{-2}$ |
| 200 | 0,51917(6) | $5,3058(1) \times 10^{-2}$ | 0,5635(3) | $5,3951(4) \times 10^{-2}$ |
| 500 | 0,51934(7) | $5,3029(3) \times 10^{-2}$ | 0,568(1) | $5,3847(4) \times 10^{-2}$ |

Tabela 5.1: Valores de saturação da densidade, ρ_{sat} , e da corrente, J_{sat} , para $\alpha = 0,8$ e $\alpha = 1,0$ em sistemas de tamanhos diferentes.

A Tabela 5.1 mostra que a densidade e a corrente de saturação realmente dependem do tamanho do sistema. Usando os dados dessa tabela podemos visualizar o comportamento da corrente e da densidade de saturação com o tamanho do sistema na região próxima à transição contínua, como mostra a Figura 5.9.

A densidade de saturação aumenta quando aumentamos o tamanho do sistema, mas ela satura antes de chegar ao valor da densidade na fase de corrente máxima. A melhor estimativa que temos para a densidade na fase de corrente máxima é $\rho_{max} = 0,5744(6)$ e para a corrente máxima é $J_{max} = 5,4085(6) \times 10^{-2}$. Note que usamos o subscrito *max* na densidade para indicar o valor da densidade (que não depende de α e β) na fase de corrente máxima, apesar

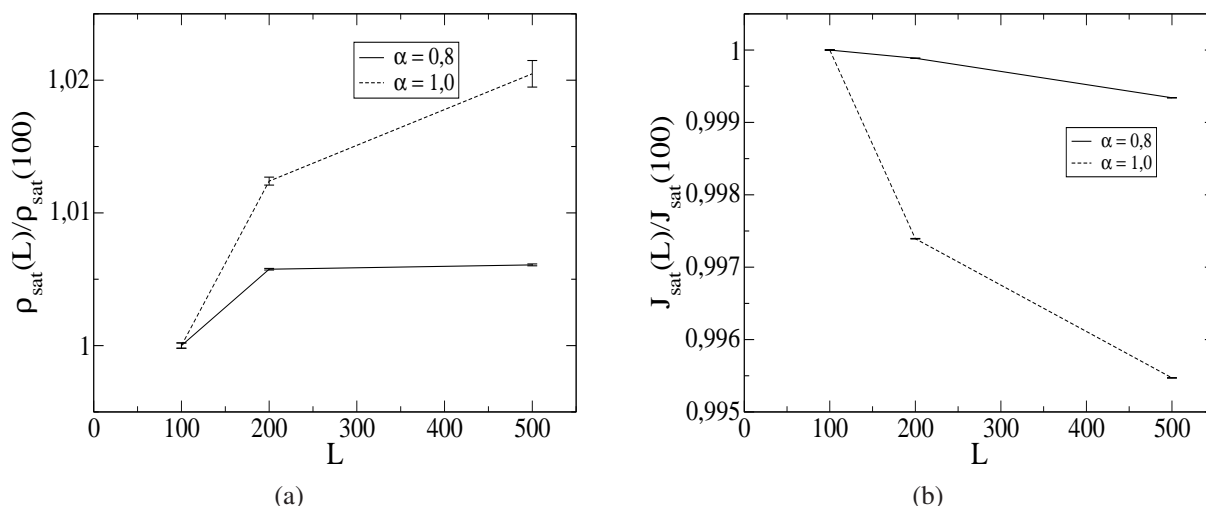


Figura 5.9: Gráficos (a) da densidade de saturação e (b) da corrente de saturação normalizadas pelo valor em $L = 100$ para o caso de $\alpha = 0,8$ e $1,0$.

desse valor não ser o valor máximo da densidade (que, na verdade, é 1). Na Figura 5.9(b), vemos que a corrente de saturação diminui com o aumento do tamanho do sistema e vai saturar abaixo do valor máximo da corrente. Com isso, podemos concluir que as transições de fase são realmente descontínuas. A fim de confirmar essa afirmação, veja a Figura 5.10, a transição para $\alpha = 0,8$ fica mais definida quando aumentamos o tamanho do sistema, o que indica que essa transição será descontínua para um sistema de tamanho infinito. O mesmo acontece para $\alpha = 1,0$.

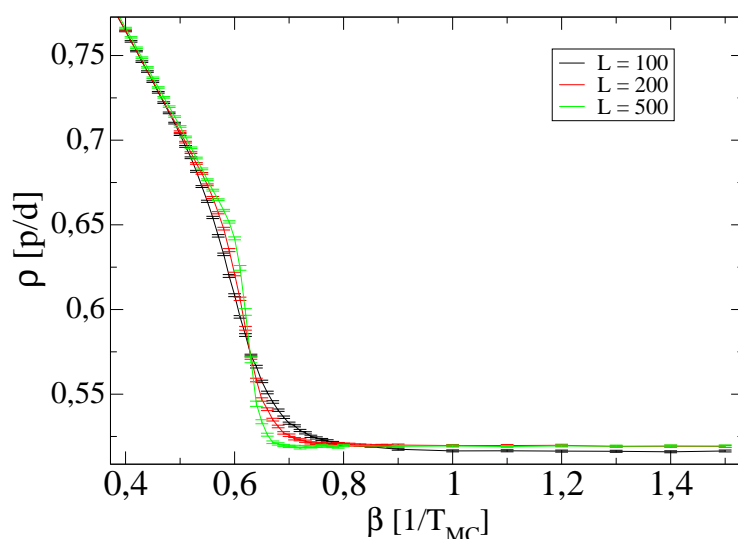


Figura 5.10: Densidade do sistema em função de β com α fixo em $0,8$ para os tamanhos $L = 100$, $L = 200$ e $L = 500$.

Quando mantemos β fixo e variamos o valor de α obtemos os gráficos de densidade e corrente que são mostrados na Figura 5.11.

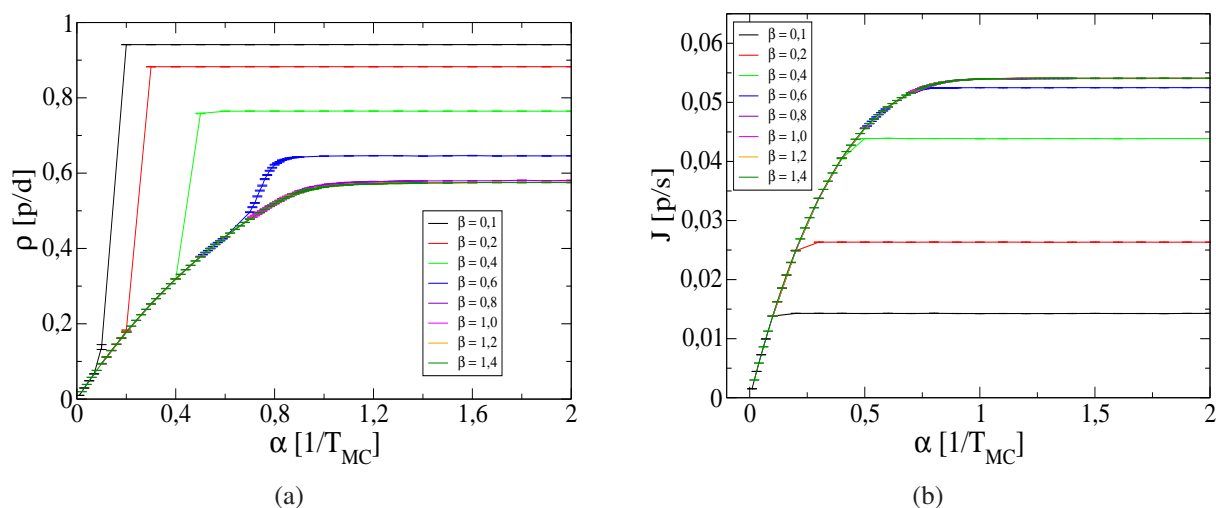


Figura 5.11: Gráficos (a) da densidade e (b) da corrente do sistema de $L=200$ poços em função de α com β fixo.

A análise aqui é correspondente ao caso onde α é mantido fixo. Podemos observar transições que certamente são descontínuas ($\beta = 0, 1, 0, 2, 0, 4$ e $0, 6$) e transições muito próximas da região de transição contínua ($\beta = 0, 8, 1, 0$ e $1, 2$) que podem ser contínuas ou ter uma pequena descontinuidade que não somos capazes de ver na escala que o gráfico é mostrado. Note que as transições descontínuas ocorrem entre a fase de densidade baixa, onde a densidade e a corrente dependem apenas de α , e a fase de densidade alta, onde a densidade e a corrente dependem apenas de β , para pequenos valores de α e β , enquanto as transições contínuas são da fase de densidade baixa para a fase de corrente máxima, onde a densidade e a corrente são independentes de α e β . Mais uma vez o modelo em espaço contínuo mostra transições cujas características são análogas às transições contínuas e descontínuas que ocorrem no TASEP em rede.

Note que incluímos a transição que ocorre em $\beta = 0, 6$ como descontínua, apesar de não vermos explicitamente um salto no valor da densidade. Mas, analogamente ao caso de $\alpha = 0, 8$, ver Figura 5.10, esperamos que, com o aumento do tamanho do sistema, essa transição descontínua fique mais definida.

As Figuras 5.8 e 5.11 são importantes na obtenção do diagrama de fase do TASEP em espaço contínuo. Para obter o diagrama de fase, precisamos encontrar para cada valor de α fixo, ou β fixo, em qual valor β_c da taxa de remoção, ou α_c da taxa de inserção, a transição (contínua ou descontínua) ocorre. Optamos por usar um processo único para determinar o ponto de transição, independente se a transição é contínua ou descontínua. A seguir, vamos detalhar, separadamente, os processos para o caso de α mantido fixo e para o caso de β fixo, apesar de serem análogos.

Preferimos usar o gráfico da corrente de partículas para determinar o ponto de transição pelo fato da corrente saturar mais rápido do que a densidade. Para o caso de α fixo, devemos calcular a corrente de saturação J_{sat} na fase de densidade baixa ou na fase de corrente máxima para cada valor de α estudado. Na fase de densidade alta a curva da corrente em função de β é única para todos os valores de α , ver Figura 5.8(b). Assim, definimos o ponto de transição como sendo o valor β_c onde a curva da corrente na fase de densidade alta encontra o valor de saturação da corrente J_{sat} . Como, para cada α , temos um valor diferente de J_{sat} , o ponto de transição β_c é também uma função de α .

Para encontrar o valor de β_c onde ocorre o encontro da curva da corrente na fase de densidade alta e a reta horizontal que representa o valor de saturação da corrente, precisamos ajustar um polinômio à curva da corrente na fase de densidade alta. Para o ajuste polinomial usamos os dados do maior valor de α fixo estudado, $\alpha = 1,4$, e um polinômio de grau 3 foi suficiente. A justificativa para se usar o maior valor de α estudado é o fato desses dados varrerem uma região maior de β e serem menos influenciados pelas transições descontínuas do que os dados para valores pequenos de α fixo. Basta observar a Figura 5.8(b) e notar que a corrente para $\alpha = 0,2$ varre uma região maior de β na fase de densidade alta do que para $\alpha = 0,1$.

No caso de β fixo, há uma transição descontínua da fase de densidade baixa para a fase de densidade alta e uma transição contínua da fase de densidade baixa para a fase de corrente máxima no sentido crescente de α . O processo de determinação do ponto de transição α_c é completamente idêntico ao caso de α mantido fixo. Usando o mesmo esquema devemos encontrar para cada valor de β a corrente de saturação J_{sat} na fase de densidade alta ou na fase de corrente máxima e obter α_c como o valor de α onde a corrente na fase de densidade baixa é igual a J_{sat} . Aqui também devemos fazer o ajuste polinomial de grau 3 para a curva da corrente na fase de densidade baixa usando os dados para o maior valor de β estudado.

Uma observação importante é que no ajuste polinomial de grau 3 à curva da corrente na fase de densidade alta (casos onde α é fixo) tivemos de aproximar o melhor possível o máximo da curva de ajuste ao máximo $J_{max} = 5,4085 \times 10^{-2} p/s$ da corrente. Isso foi feito para que fosse possível encontrar o ponto onde as transições contínuas ocorrem. Se não impormos essa condição o ajuste resulta numa curva cujo máximo ocorre abaixo do valor máximo J_{max} da corrente, o que impossibilita a determinação dos pontos de transição na região próxima à transição contínua. Além disso, fixamos o termo independente, no caso α fixo e no caso β fixo, em zero, pois é esperado que para α ou β nulos a corrente seja nula.

Usando o esquema discutido acima, obtemos os pontos α_c e β_c onde ocorrem as transições, os quais são mostrados na Tabela 5.2.

| α | J_{sat} | β_c | β | J_{sat} | α_c |
|----------|----------------------------|------------|---------|-----------------------------|------------|
| 0,1 | $1,3815(6) \times 10^{-2}$ | 0,09625(6) | 0,1 | $1,4261(5) \times 10^{-2}$ | 0,10370(4) |
| 0,2 | $2,4946(4) \times 10^{-2}$ | 0,1874(4) | 0,2 | $2,6335(3) \times 10^{-2}$ | 0,2142(3) |
| 0,4 | $4,0526(5) \times 10^{-2}$ | 0,353(2) | 0,4 | $4,3874(5) \times 10^{-2}$ | 0,462(2) |
| 0,6 | $4,9225(4) \times 10^{-2}$ | 0,492(7) | 0,6 | $5,2493(4) \times 10^{-2}$ | 0,73(2) |
| 0,8 | $5,3063(3) \times 10^{-2}$ | 0,59(2) | 0,7 | $5,3789(2) \times 10^{-2}$ | 0,81(3) |
| 0,9 | $5,3716(2) \times 10^{-2}$ | 0,61(2) | 0,8 | $5,4035(2) \times 10^{-2}$ | 0,83(3) |
| 1,0 | $5,3950(1) \times 10^{-2}$ | 0,62(2) | 0,9 | $5,4074(1) \times 10^{-2}$ | 0,84(3) |
| 1,1 | $5,4026(3) \times 10^{-2}$ | 0,62(2) | 1,0 | $5,4082(3) \times 10^{-2}$ | 0,84(3) |
| 1,2 | $5,4058(2) \times 10^{-2}$ | 0,63(2) | 1,2 | $5,4092(1) \times 10^{-2}$ | 0,84(3) |
| 1,4 | $5,4079(2) \times 10^{-2}$ | 0,63(2) | 1,4 | $5,40894(6) \times 10^{-2}$ | 0,84(3) |

Tabela 5.2: Pontos onde ocorrem as transições de fase e os respectivos valores de saturação da corrente J_{sat} .

Note que, na Tabela 5.2, aparecem pontos de transição para α fixo em 0,9 e 1,0 e β fixo em 0,7 e 0,9. Para esses casos obtivemos apenas o valor da corrente de saturação, ou seja, medimos a corrente apenas para valores grandes de β e α , respectivamente. Uma vez que já temos o ajuste para a curva da corrente, para determinar o ponto de transição nesses casos, só precisamos do valor de saturação da corrente. Inserindo os dados da Tabela 5.2 num gráfico de β versus α , obtemos o diagrama de fase do TASEP em espaço contínuo, como mostra a Figura 5.12.

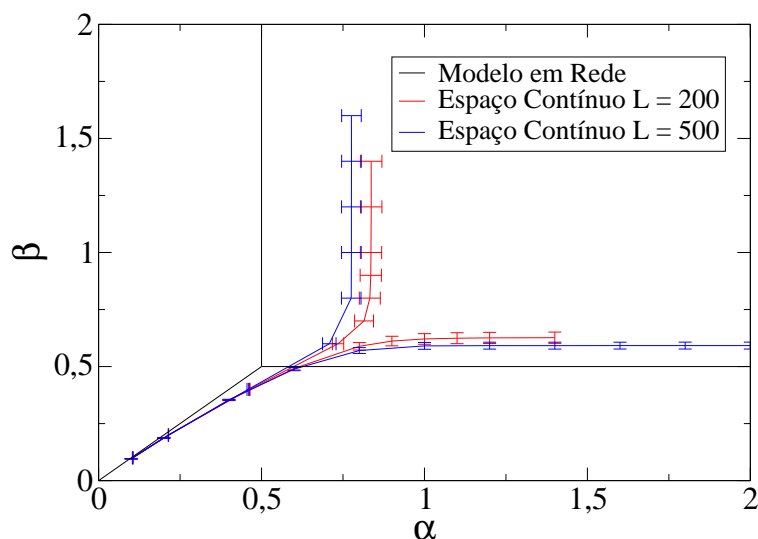


Figura 5.12: Diagrama de fase do TASEP em rede e em espaço contínuo para $L = 200$ e $L = 500$.

Na figura acima podemos notar algumas semelhanças entre o diagrama de fase do modelo em rede com o modelo em espaço contínuo. Mas algumas diferenças nos chamam a atenção.

A linha de transição de fase descontínua é uma reta de inclinação 1 para o TASEP em rede e as linhas de transição contínua ocorrem em $\alpha = 1/2$ e $\beta > 1/2$ e em $\beta = 1/2$ e $\alpha > 1/2$. Isso revela a simetria partícula-buraco presente no modelo em rede, ou seja, podemos imaginar que os buracos se movem para a esquerda, enquanto as partículas estão paradas, são inseridos com uma taxa β no último sítio e removidos com uma taxa α no primeiro sítio. Isso fica evidente no diagrama de fase que é simétrico por uma troca de $\alpha \leftrightarrow \beta$. Para o modelo em espaço contínuo, a linha de transição descontínua é, aproximadamente, uma parábola e as linhas de transição contínua não estão simetricamente localizadas como no diagrama do TASEP em rede. A diferença entre os comportamentos dos modelos em rede e no espaço contínuo é esperada, inclusive a ausência de simetria partícula-buraco em espaço contínuo. Tal ausência é esperada, porque (diferente que o modelo em rede) um poço ocupado em espaço contínuo não é meramente a ausência de um buraco: ele contém um objeto (a partícula) que flutua, enquanto o poço vazio não é sede de flutuações.

A Figura 5.12 mostra também o diagrama de fase para $L = 500$ poços. Note que esse diagrama se aproxima mais do diagrama do modelo em rede. Mas é esperado que num sistema de tamanho infinito o diagrama não irá resultar no diagrama em rede por causa da ausência de simetria partícula-buraco.

A falta de simetria partícula-buraco é ainda mais evidente no gráfico da corrente *versus* a densidade do sistema, como mostra a Figura 5.13. Da teoria de campo médio do modelo em rede [1], obtém-se $J = \rho(1 - \rho)$ para a dependência da corrente em termos da densidade. A curva indicada na Figura 5.13 é muito bem aproximada à curva de campo médio, que na verdade, é a curva exata para o modelo em rede. Mas note que a curva da corrente em função da densidade não é simétrica ao redor de $\rho = 1/2$.

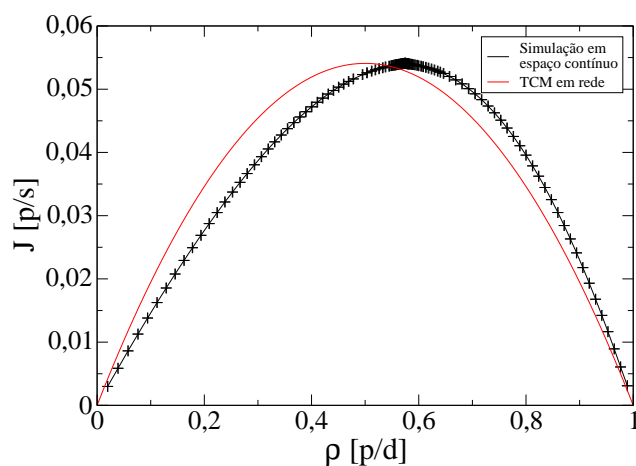


Figura 5.13: Corrente em função da densidade para $L = 200$ e para a teoria de campo médio do TASEP em rede.

Um resultado interessante é obtido quando fazemos o gráfico da variância da densidade em função de α com β fixo ou em função de β com α fixo, veja a Figura (5.14). O gráfico mostra que a densidade flutua muito no ponto onde ocorre a transição descontínua. Supõe-se que tal oscilação é devida ao fato da densidade, durante a transição descontínua, estar oscilando entre dois valores muito diferentes, com já tínhamos observado na discussão da Figura (5.5).

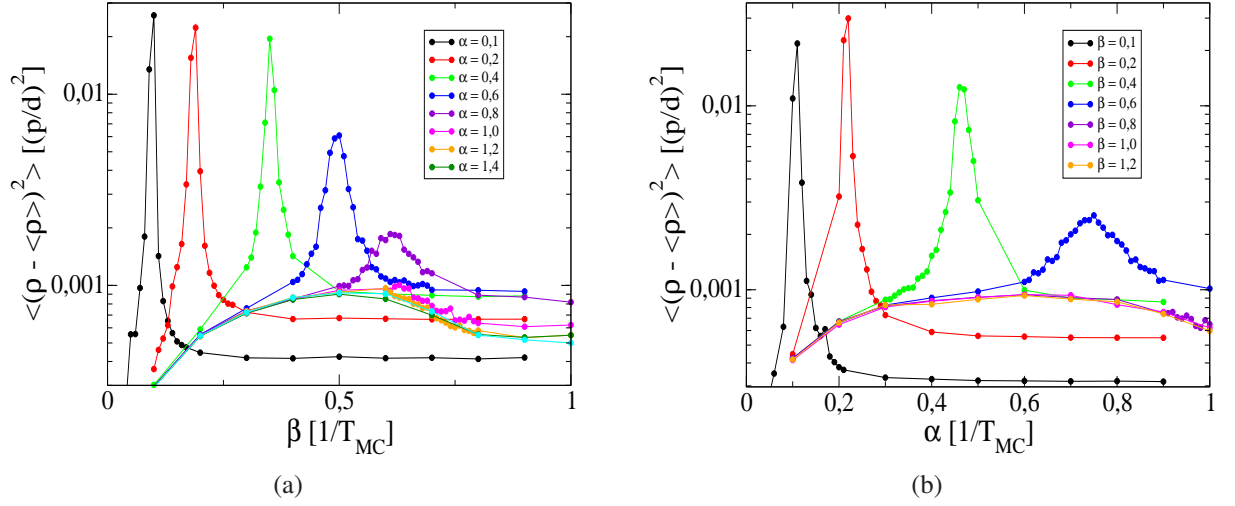


Figura 5.14: A variância da densidade total do sistema para (a) α mantido fixo e para (b) β mantido fixo.

Além da corrente e da densidade, medimos também a energia potencial externa média por partícula, dada por

$$\langle V_{ext} \rangle = -\frac{V_0}{N} \sum_{i=1}^N \langle \cos(\pi x_i) \rangle, \quad (5.2)$$

e a energia potencial média de interação, dada por

$$\langle V_{int} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N-1} \langle V_{int}(x_{i+1} - x_i) \rangle, \quad (5.3)$$

onde V_{int} é dado por 4.10 e x_i é a posição da partícula i . A Figura 5.15 mostra gráficos de $\langle V_{ext} \rangle$ e de $\langle V_{int} \rangle$ para os casos de α fixo e β fixo. Note que o comportamento das energias potenciais médias externa e de interação é análogo ao comportamento da densidade do sistema.

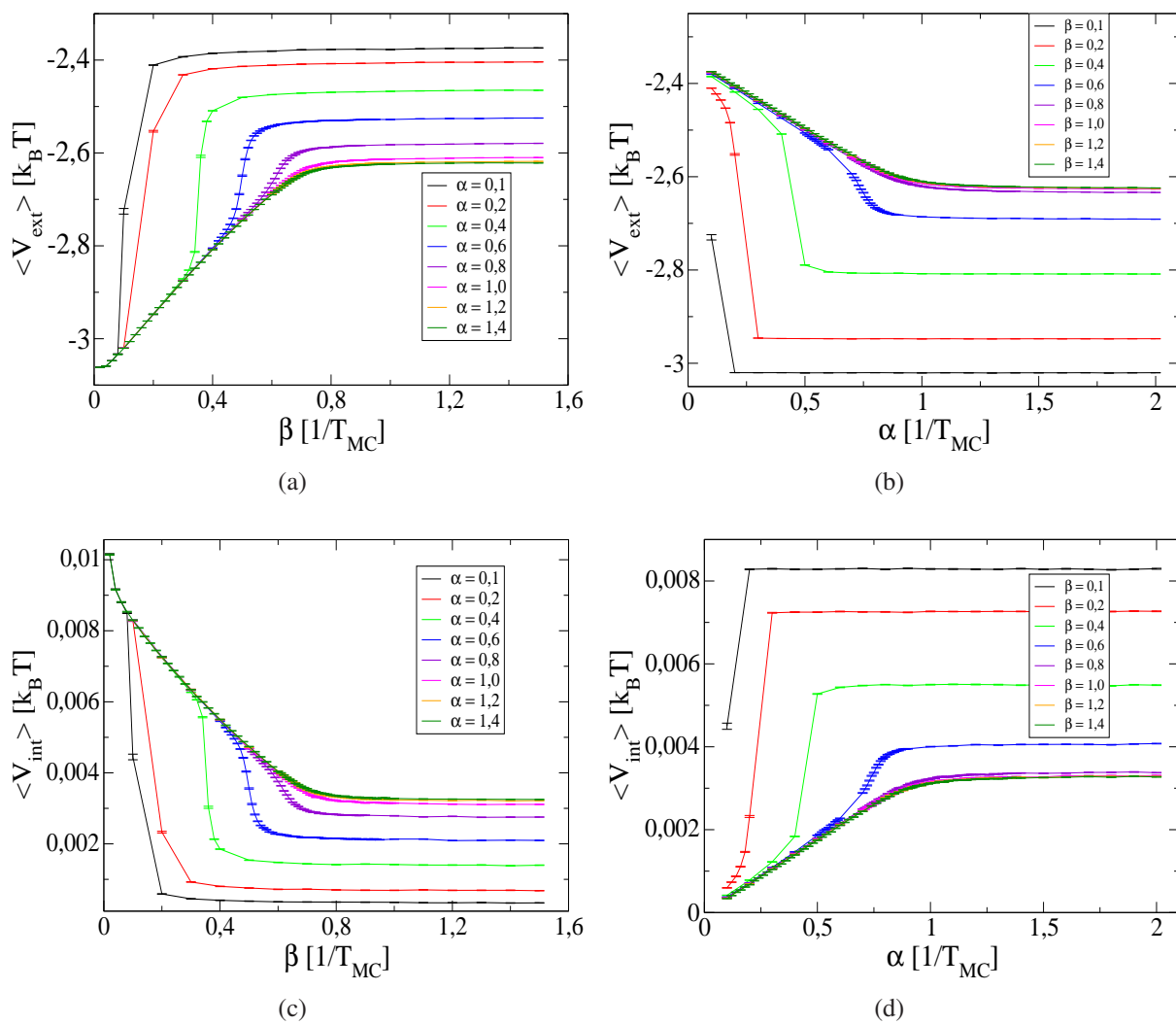


Figura 5.15: A energia potencial externa média por partícula (a) para α fixo e (b) para β fixo e a energia potencial de interação média (c) para α fixo e (d) para β fixo.

6 *Conclusões e Perspectivas*

Propusemos um modelo em espaço contínuo, correspondente ao TASEP em rede, que consiste de um sistema de partículas brownianas interagentes num potencial externo periódico. O modelo foi definido de modo a garantir o máximo possível de semelhança com uma realização experimental do TASEP. Para evoluir o sistema no tempo, usamos, principalmente, simulações de Monte Carlo dinâmico que se mostraram estar em razoável acordo com as simulações do método de Langevin. As simulações de Monte Carlo são preferidas devido ao baixo tempo de simulação, especialmente quando comparadas com as simulações de Langevin.

Estudamos o sistema de partículas brownianas para os seguintes tamanhos $L = 100$, $L = 200$ e $L = 500$ poços, sendo que as simulações foram mais extensivas para $L = 200$. Com tamanhos diferentes podemos observar no perfil de densidade e na densidade do sistema os efeitos do tamanho finito do sistema sobre os resultados obtidos. Os resultados para $L = 200$ mostraram que o TASEP em espaço contínuo apresenta transições de fase análogas às transições contínuas e descontínuas que ocorrem no modelo em rede. Determinando as taxas α e β onde tais transições ocorrem, encontramos o diagrama da fase do modelo. Tal diagrama é semelhante ao diagrama de fase do modelo em rede, mas exibe uma diferença notável: a ausência da simetria partícula-buraco no modelo em espaço contínuo. Supõe-se que essa diferença é devido ao fato de que no modelo em espaço contínuo uma partícula ocupando um poço pode flutuar ao redor do mínimo de potencial, fato que não ocorre no modelo em rede. Essa falta de simetria também pode ser observada na curva da corrente de partículas em função da densidade do sistema.

Com o intuito de determinar mais precisamente o diagrama de fase, é preciso estudar sistemas de tamanhos maiores a fim de diminuir os efeitos do tamanho finito do sistema. Para obter uma maior veracidade do modelo do TASEP em espaço contínuo e, portanto, melhores resultados para a comparação com futuros experimentos, é necessário incluir interações hidrodinâmicas entre as partículas brownianas e estudar o sistema de partículas em dimensões maiores, por exemplo, permitindo que as partículas possam se movimentar na direção radial do tubo e não apenas na direção longitudinal como foi feito até agora. Esses são os principais objetivos de estudos futuros.

APÊNDICE A – Prova das Expressões (1.53) e (1.54)

A.1 Dedução da Expressão (1.53)

Nessa seção vamos nos dedicar à prova da expressão (1.53), a saber:

$$\langle W|C^N|V\rangle = \sum_{p=1}^N \frac{p(2N-1-p)!}{N!(N-p)!} \frac{(1/\beta)^{p+1} - (1/\alpha)^{p+1}}{1/\beta - 1/\alpha}. \quad (\text{A.1})$$

Vamos começar a prova da expressão acima escrevendo duas identidades que serão de grande utilidade:

(i) para $0 \leq p \leq n+1$

$$\frac{p(2n+1-p)!}{(n+1)!(n+1-p)!} - \frac{(p+1)(2n-p)!}{(n+1)!(n-p)!} = \frac{(p-1)(2n-p)!}{n!(n+1-p)!} \quad (\text{A.2})$$

onde para $p = n+1$ fizemos a convenção que $(n-p)! = (-1)! \equiv \infty$. A igualdade acima pode ser provada diretamente como a seguir:

$$\begin{aligned} & \frac{p(2n+1-p)!}{(n+1)!(n+1-p)!} - \frac{(p+1)(2n-p)!}{(n+1)!(n-p)!} \\ &= \frac{(2n-p)!}{(n+1)!(n+1-p)!} [p(2n+1-p) - (n-p+1)(p+1)] \\ &= \frac{(2n-p)!}{(n+1)!(n+1-p)!} (n+1)(p-1) = \frac{(2n-p)!}{n!(n+1-p)!} (p-1). \end{aligned}$$

(ii) para $n \geq 0$

$$D^n C = C + \sum_{q=2}^{n+1} D^q = \frac{D^{n+2} - D^2}{D-1} + C = \frac{D^{n+2} - D}{D-1} + E \quad (\text{A.3})$$

onde usamos a seguinte notação compacta $(D^{n+1} - D)(D-1)^{-1} \equiv D^n + D^{n-1} + \dots + D$ de modo que a questão se $D-1$ é inversível ou não é irrelevante. Note que essa notação é consis-

tente uma vez que

$$\begin{aligned}
 (D^{n+1} - D)(D - 1)^{-1} &= (D - D^{n+1})(1 - D)^{-1} \\
 &= (D - D^{n+1})(1 + D + D^2 + D^3 \dots) \\
 &= D + D^2 + D^3 + \dots - D^{n+1} - D^{n+2} - D^{n+3} \dots \\
 &= D + D^2 + D^3 + \dots + D^{n-1} + D^n.
 \end{aligned}$$

A relação (A.3) segue imediatamente de $DE = D + E$ e $C = D + E$ (ver (1.8) e (1.11), respectivamente). Usando essas duas expressões temos

$$\begin{aligned}
 D^n C &= D^{n-1}(DC) = D^{n-1}(D^2 + DE) = D^{n-1}(D^2 + C) \\
 &= D^{n-2}(D^3 + DC) = D^{n-2}(D^3 + D^2 + C) \\
 &= \dots \\
 &= D^{n+1} + D^n + \dots + D^2 + C = \sum_{q=2}^{n+1} D^q + C \\
 &= \sum_{q=1}^{n+1} D^q + E
 \end{aligned}$$

onde na quarta linha escrevemos o resultado esperado para a expressão após repetirmos n vezes o processo feito na primeira linha. Agora, usando a notação definida, é fácil ver que a igualdade (A.3) é verdadeira.

Agora que já estabelecemos e provamos as duas igualdades (A.2) e (A.3) podemos voltar à demonstração da relação (A.1). Primeiro devemos provar que

$$C^n = \sum_{p=0}^n \frac{p(2n-1-p)!}{n!(n-p)!} \sum_{q=0}^p E^q D^{p-q} \quad (\text{A.4})$$

Vamos checar essa expressão para $n = 1$ e provar por indução para $n > 1$. Para $n = 1$ a expressão (A.4) resulta em

$$C = \sum_{p=0}^1 p \sum_{q=0}^p E^q D^{p-q} = \sum_{q=0}^1 E^q D^{1-q} = D + E$$

que concorda com (1.8). Se supomos que (A.4) é verdade para n , podemos encontrar C^{n+1} multiplicando C^n pela direita por C para encontrar

$$\begin{aligned}
 C^{n+1} &= \sum_{p=0}^n \frac{p(2n-1-p)!}{n!(n-p)!} \sum_{q=0}^p [E^q D^{p-q} C] \\
 &= \sum_{p=0}^n \frac{p(2n-1-p)!}{n!(n-p)!} \sum_{q=0}^p \left[E^{q+1} + E^q \left(\frac{D^{p-q+2} - D}{D-1} \right) \right] \quad (\text{A.5})
 \end{aligned}$$

onde usamos (A.3) com $n = p - q$. Agora, trocando $p \rightarrow p + 1$ em (A.2) temos

$$\frac{(p+1)(2n-p)!}{(n+1)!(n-p)!} - \frac{(p+2)(2n-1-p)!}{(n+1)!(n-1-p)!} = \frac{p(2n-1-p)!}{n!(n-p)!}$$

que aplicado em (A.5) resulta em

$$\begin{aligned} C^{n+1} = & \sum_{p=0}^n \frac{(p+1)(2n-p)!}{(n+1)!(n-p)!} \sum_{q=0}^p \left[E^{q+1} + E^q \left(\frac{D^{p-q+2} - D}{D-1} \right) \right] \\ & - \sum_{p=0}^n \frac{(p+2)(2n-p-1)!}{(n+1)!(n-p-1)!} \sum_{q=0}^p \left[E^{q+1} + E^q \left(\frac{D^{p-q+2} - D}{D-1} \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Fazendo $p \rightarrow p - 1$ no primeiro termo e $p \rightarrow p - 2$ no segundo termo, podemos reescrever a expressão acima como

$$\begin{aligned} C^{n+1} = & \sum_{p=1}^{n+1} \frac{p(2n+1-p)!}{(n+1)!(n-p+1)!} \sum_{q=0}^{p-1} \left[E^{q+1} + E^q \left(\frac{D^{p-q+1} - D}{D-1} \right) \right] \\ & - \sum_{p=2}^{n+2} \frac{p(2n+1-p)!}{(n+1)!(n-p+1)!} \sum_{q=0}^{p-2} \left[E^{q+1} + E^q \left(\frac{D^{p-q} - D}{D-1} \right) \right]. \end{aligned}$$

Somando separadamente o primeiro termo do primeiro somatório ($p = 1$) com o último termo do segundo somatório ($p = n + 2$) temos o resultado

$$\begin{aligned} & \frac{(2n)!}{(n+1)!n!} \left[E + \frac{D^2 - D}{D-1} \right] \\ & - \frac{(n+2)(n-1)!}{(n+1)!(-1)!} \sum_{q=0}^n \left[E^{q+1} + E^q \left(\frac{D^{n+2-q} - D}{D-1} \right) \right] = \frac{(2n)!}{(n+1)!n!} (E + D) \end{aligned}$$

onde usamos, de acordo com a nossa notação e convenção, $(D^2 - D)(D-1)^{-1} = D$ e $(-1)! = \infty$. Essa separação nos permite juntar os dois somatórios em p num só e escrever C^{n+1} da seguinte forma

$$\begin{aligned} C^{n+1} = & \frac{(2n)!}{(n+1)!n!} (E + D) + \sum_{p=2}^{n+1} \frac{p(2n+1-p)!}{(n+1)!(n-p+1)!} \\ & \times \left\{ \sum_{q=0}^{p-1} \left[E^{q+1} + E^q \left(\frac{D^{p-q+1} - D}{D-1} \right) \right] \right. \\ & \left. - \sum_{q=0}^{p-2} \left[E^{q+1} + E^q \left(\frac{D^{p-q} - D}{D-1} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Veja a expressão que está entre chaves na equação acima. Vamos somar o primeiro termo dessa

expressão com o terceiro termo para obter

$$\sum_{q=0}^{p-1} E^{q+1} - \sum_{q=0}^{p-2} E^{q+1} = \sum_{q=0}^{p-2} E^{q+1} + E^p - \sum_{q=0}^{p-2} E^{q+1} = E^p \quad (\text{A.8})$$

onde na primeira igualdade escrevemos separadamente o último termo da primeira soma. Agora vamos somar o segundo termo entre chaves com o quarto termo para obter

$$\begin{aligned} & \sum_{q=0}^{p-1} E^q \frac{D^{p-q+1} - D}{D-1} - \sum_{q=0}^{p-2} E^q \frac{D^{p-q} - D}{D-1} \\ &= \sum_{q=0}^{p-1} E^q \left[\frac{D^{p-q+1} - D}{D-1} - \frac{D^{p-q} - D}{D-1} \right] \\ &= \sum_{q=0}^{p-1} E^q \left[\frac{D^{p-q+1} - D^{p-q}}{D-1} \right] = \sum_{q=0}^{p-1} E^q D^{p-q}. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Note que na segunda linha estendemos a segunda soma até $q = p - 1$ sem precisar acrescentar um termo para compensar pois esse termo é nulo, veja:

$$E^q \frac{D^{p-q} - D}{D-1} \Big|_{q=p-1} = E^{p-1} \left(\frac{D^{p-p+1} - D}{D-1} \right) = E^{p-1} \left(\frac{D^1 - D}{D-1} \right) = 0.$$

A última igualdade em (A.9) pode ser obtida diretamente colocando D^{p-q} em evidência e cancelando o termo $(D-1)$ do numerador com o mesmo termo presente no denominador. Ou, de uma forma mais longa, substituindo $(D^{n+1} - D)(D-1) = D^n + D^{n-1} + \dots + D$ (com $n = p - q + 1$ ou $n = p - q$) e verificando que o único termo que sobra é D^{p-q} . A última maneira é a mais correta, pois $(D^{n+1} - D)(D-1)$ é apenas uma notação para $D^n + D^{n-1} + \dots + D$, mas o resultado é o mesmo. Usando os resultados expressados em (A.8) e (A.9) podemos escrever C^{n+1} da seguinte forma

$$\begin{aligned} C^{n+1} &= \frac{(2n)!}{(n+1)!n!} (E + D) \\ &+ \sum_{p=2}^{n+1} \frac{p(2n+1-p)!}{(n+1)!(n-p+1)!} \left[E^p + \sum_{q=0}^{p-1} E^q D^{p-q} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Note que o primeiro termo da expressão acima pode ser incluído no somatório fazendo a soma começar em $p = 1$ e que, como o termo $p = 0$ é nulo, a soma pode começar de $p = 0$. E, por último, note que $E^p = E^q D^{p-q}$ quando $p = q$, assim podemos incluir o termo E^p no somatório em q e estender a soma em q até p . E assim obtemos, finalmente, o resultado

$$C^{n+1} = \sum_{p=0}^{n+1} \frac{p(2n+1-p)!}{(n+1)!(n-p+1)!} \sum_{q=0}^p E^q D^{p-q}. \quad (\text{A.11})$$

Essa é a mesma expressão que obteríamos via (A.4) se substituíssemos n por $n + 1$, logo a expressão (A.4) está provada por recursão.

Agora podemos voltar para a prova da expressão (A.1). Vamos calcular os elementos de matriz $\langle W|C^n|V\rangle$, para $n \geq 1$, simplesmente usando (A.4) e a álgebra (1.9),(1.10). Primeiro vamos substituir (A.4) para obter

$$\begin{aligned}\langle W|C^n|V\rangle &= \sum_{p=0}^n \frac{p(2n-1-p)!}{n!(n-p)!} \sum_{q=0}^p \langle W|E^q D^{p-q}|V\rangle \\ &= \sum_{p=0}^n \frac{p(2n-1-p)!}{n!(n-p)!} \sum_{q=0}^p \frac{1}{\alpha^q} \frac{1}{\beta^{p-q}} \langle W|V\rangle\end{aligned}$$

onde usamos as propriedades (1.9) e (1.10). Vamos reescrever a soma em q como

$$\sum_{q=0}^p \frac{1}{\alpha^q} \frac{1}{\beta^{p-q}} = \frac{1}{\beta^p} \sum_{q=0}^p \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^q = \frac{1}{\beta^p} \left[\frac{(\beta/\alpha)^{p+1} - 1}{\beta/\alpha - 1} \right] = \frac{(1/\beta)^{p+1} - (1/\alpha)^{p+1}}{1/\beta - 1/\alpha}$$

onde usamos a fórmula da série geométrica $S_N = \frac{a_1(Q^N - 1)}{Q - 1}$ com $N = p + 1$ sendo o número de termos, $a_1 = 1/\beta$ o primeiro termo e $Q = \beta/\alpha$ a razão da série. Com esse resultado e lembrando que pela normalização $\langle W|V\rangle = 1$ temos

$$\langle W|C^n|V\rangle = \sum_{p=0}^n \frac{p(2n-1-p)!}{n!(n-p)!} \frac{(1/\beta)^{p+1} - (1/\alpha)^{p+1}}{1/\beta - 1/\alpha} \quad \text{para } n \geq 1.$$

É importante ressaltar que a relação (A.1), ou (1.53), é uma consequência direta das relações (1.8)-(1.10), sem referência nenhuma a qualquer forma particular das matrizes envolvidas. Todo o processo seguido para provar a relação (1.53) pode ser traduzido como uma tentativa de se escrever $C^n = (D + E)^n$ como uma série irredutível do tipo:

$$C^n = \sum_{i,j} a_{i,j} E^i D^j.$$

Isso é possível devido a propriedade (1.8) das matrizes D e E que permite escrever qualquer termo do tipo $D^k E^l$ em termos de $\sum_{i,j} E^i D^j$. Por exemplo, usando (1.8) podemos escrever $D^3 E^2 = D^3 + 2D^2 + 3(D + E) + E^2$. Note que essa expansão se torna conveniente quando fazemos o produto $\langle W|C^n|V\rangle$ e usamos as propriedades (1.9) e (1.10) pois

$$\langle W|C^n|V\rangle = \sum_{i,j} a_{i,j} \langle W|E^i D^j|V\rangle = \sum_{i,j} a_{i,j} \frac{\langle W|V\rangle}{\alpha^i \beta^j}.$$

A.2 Dedução da Expressão (1.54)

Nessa seção vamos provar a relação (1.54), a saber:

$$DC^n = \sum_{p=0}^{n-1} \frac{(2p)!}{p!(p+1)!} C^{n-p} + \sum_{p=2}^{n+1} \frac{(p-1)(2n-p)!}{n!(n+1-p)!} D^p, \quad (\text{A.12})$$

usando uma técnica similar àquela usada para provar a relação (1.53). Primeiro note que para $n = 1$ temos de (A.12) $DC = C + D^2$ que concorda com (A.3). Assumindo que (A.12) vale para n , vamos checar que ela é válida para $n + 1$ multiplicando pela direita por C para obter

$$\begin{aligned} DC^{n+1} &= \sum_{p=0}^{n-1} \frac{(2p)!}{p!(p+1)!} C^{n+1-p} + \sum_{p=2}^{n+1} \frac{(p-1)(2n-p)!}{n!(n+1-p)!} D^p C \\ &= \sum_{p=0}^{n-1} \frac{(2p)!}{p!(p+1)!} C^{n+1-p} + \sum_{p=2}^{n+1} \frac{(p-1)(2n-p)!}{n!(n+1-p)!} \sum_{q=2}^{p+1} D^q \\ &\quad + C \sum_{p=2}^{n+1} \frac{(p-1)(2n-p)!}{n!(n+1-p)!} \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

onde na segunda igualdade utilizamos (A.3). Vamos trocar a ordem das somas no segundo termo da expressão acima. Note que estamos somando em q limitado a $2 \leq q \leq p + 1$ e somando em p limitado a $2 \leq p \leq n + 1$ (q está limitado por p pois é a soma mais interna). Dessas relações podemos concluir que o valor máximo de q é $n + 2$ e o de p é $n + 1$ e ainda que p limita o valor de q superiormente e, portanto, q limita o valor de p inferiormente. Se trocarmos a ordem da soma, é fácil ver que valerá as seguintes relações: $q - 1 \leq p \leq n + 1$ e $2 \leq q \leq n + 2$. Assim podemos escrever

$$\begin{aligned} DC^{n+1} &= \sum_{p=0}^{n-1} \frac{(2p)!}{p!(p+1)!} C^{n+1-p} + \sum_{q=2}^{n+2} D^q \sum_{p=q-1}^{n+1} \frac{(p-1)(2n-p)!}{n!(n+1-p)!} \\ &\quad + C \sum_{p=2}^{n+1} \frac{(p-1)(2n-p)!}{n!(n+1-p)!} \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Agora vamos somar a igualdade (A.2) da seguinte forma

$$\begin{aligned} \sum_{p=q-1}^{n+1} \frac{(p-1)(2n-p)!}{n!(n+1-p)!} &= \sum_{p=q-1}^{n+1} \frac{p(2n+1-p)!}{(n+1)!(n+1-p)!} - \sum_{p=q-1}^{n+1} \frac{(p+1)(2n-p)!}{(n+1)!(n-p)!} \\ &= \sum_{p=q-2}^n \frac{(p+1)(2n-p)!}{(n+1)!(n-p)!} - \sum_{p=q-1}^{n+1} \frac{(p+1)(2n-p)!}{(n+1)!(n-p)!} \\ &= \frac{(q-1)(2n-q+2)!}{(n+1)!(n-q+2)!} - \frac{(n+2)(n-1)!}{(n+1)!(-1)!} \\ &= \frac{(q-1)(2n-q+2)!}{(n+1)!(n-q+2)!} \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

onde na segunda linha trocamos $p \rightarrow p + 1$, na terceira linha mantemos apenas o primeiro termo do primeiro somatório e o último termo do segundo somatório sendo que o restante se cancela e da terceira para quarta linha usamos a nossa convenção que $(-1)! = \infty$. Substituindo (A.15) no segundo e no terceiro termo de (A.14) (com $q = 3$ para o terceiro termo) temos

$$DC^{n+1} = \sum_{p=0}^{n-1} \frac{(2p)!}{p!(p+1)!} C^{n+1-p} + \sum_{q=2}^{n+2} D^q \frac{(q-1)(2n+2-q)!}{(n+1)!(n+2-q)!} + \frac{2(2n-1)!}{(n-1)!(n+1)!} C.$$

Note que podemos reescrever o último termo acima da seguinte forma

$$\frac{2(2n-1)!}{(n-1)!(n+1)!} C = \frac{2n(2n-1)!}{n(n-1)!(n+1)!} C = \frac{(2n)!}{n!(n+1)!} C$$

e que esse termo é igual ao termo $p = n$ do primeiro somatório. Juntando esse termo no primeiro somatório e trocando $q \rightarrow p$ podemos escrever

$$DC^{n+1} = \sum_{p=0}^n \frac{(2p)!}{p!(p+1)!} C^{n+1-p} + \sum_{p=2}^{n+2} D^p \frac{(p-1)(2n+2-p)!}{(n+1)!(n+2-p)!}$$

que pode ser obtida de (A.12) trocando $n \rightarrow n + 1$. Portanto, a expressão (A.12) para DC^n está provada por recursão.

APÊNDICE B – Prova da Expressão (1.61)

Nesse apêndice vamos nos concentrar na obtenção dos valores assintóticos de

$$R_n(x) = \sum_{p=2}^{n+1} \frac{(p-1)(2n-p)!}{n!(n+1-p)!} x^p \quad (\text{B.1})$$

quando N é grande. Por conveniência vamos fazer a seguinte definição:

$$Q(p) \equiv \frac{(p-1)(2n-p)!}{n!(n-p+1)!} x^p = \frac{p-1}{n-p+1} \frac{(2n-p)!}{n!(n-p)!} x^p. \quad (\text{B.2})$$

Para n grande a relação de Stirling

$$\ln(n!) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \ln n - n + \frac{1}{2} \ln(2\pi) \quad (\text{B.3})$$

é uma boa aproximação e podemos usá-la para escrever o logaritmo natural de (B.2) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \ln Q(p) &= \ln(p-1) - \ln(n-p+1) + (2n-p + \frac{1}{2}) \ln(2n-p) - (2n-p) \\ &\quad + \frac{1}{2} \ln(2\pi) - (n + \frac{1}{2}) \ln n + n - \frac{1}{2} \ln(2\pi) \\ &\quad - (n-p + \frac{1}{2}) \ln(n-p) + (n-p) - \frac{1}{2} \ln(2\pi) + p \ln x \\ &= \ln(p-1) - \ln(n-p+1) + (2n-p + \frac{1}{2}) \ln(2n-p) \\ &\quad - (n + \frac{1}{2}) \ln n - (n-p + \frac{1}{2}) \ln(n-p) - \frac{1}{2} \ln(2\pi) + p \ln x \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

onde cancelamos alguns termos da primeira igualdade para obter a segunda igualdade. Agora vamos assumir que p é uma variável contínua e calcular a primeira derivada de $\ln Q(p)$ em

relação a p . Fazendo isso temos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dp} \ln Q(p) &= \frac{1}{p-1} + \frac{1}{n-p+1} - \frac{2n-p+1/2}{2n-p} - \ln(2n-p) \\ &\quad + \frac{n-p+1/2}{n-p} + \ln(n-p) + \ln x \\ &= \frac{1}{p-1} + \frac{1}{n-p+1} - \frac{1/2}{2n-p} - \ln(2n-p) \\ &\quad + \frac{1/2}{n-p} + \ln(n-p) + \ln x. \end{aligned} \tag{B.5}$$

Queremos encontrar o valor $p = p^*$ que maximiza $\ln Q(p)$. Para tal vamos assumir $p^* = \lambda n$ e substituir na expressão acima com $(d \ln Q(p^*)/dp) = 0$ para obter

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{1}{n} \left[\frac{1}{\lambda - 1/n} + \frac{1}{1 - \lambda + 1/n} - \frac{1/2}{2 - \lambda} + \frac{1/2}{1 - \lambda} \right] \\ &\quad - \ln n - \ln(2 - \lambda) + \ln n + \ln(1 - \lambda) + \ln x. \end{aligned}$$

Para n muito grande podemos desprezar os termos proporcionais a $1/n$ e isolar λ para obter

$$\lambda = \frac{x-2}{x-1}. \tag{B.6}$$

Note que, segundo a expressão acima, $p^* = \lambda n$ é positivo para $x > 2$ e negativo para $1 < x < 2$. Note que $x > 1$ pois $1/x = \beta < 1$ ou $1/x = \alpha < 1$. Como p só pode assumir valores positivos, o máximo de (B.4) ocorre em $p^* = 0$ para $x < 2$. Para $x = 2$, só podemos dizer que p^* não é linear em p , devemos esperar $p^* \sim n^a$ com $a < 1$. Nesse caso temos $1 \ll p \ll n$ no limite $n \rightarrow \infty$. Assim podemos escrever (B.5) da seguinte maneira

$$\begin{aligned} \frac{d}{dp} \ln Q(p) &= \frac{1}{p} + \frac{1}{n} \left\{ \frac{1}{1-p/n} - \frac{1}{4} \frac{1}{1-p/2n} + \frac{1}{2} \frac{1}{1-p/n} \right\} \\ &\quad - \ln \left[1 - \frac{p}{2n} \right] + \ln \left[1 - \frac{p}{n} \right] + \ln \left[\frac{nx}{2n} \right]. \end{aligned}$$

Podemos desprezar o termo entre chaves na expressão acima pois devido ao fator $1/n$, ele só apresenta contribuições de segunda ordem em $1/n$. Fazendo $x = 2$ e expandindo os logaritmos até primeira ordem, temos

$$\frac{d}{dp} \ln Q(p) = \frac{1}{p} + \frac{p}{2n} - \frac{p}{n} + \dots = \frac{1}{p} - \frac{p}{2n} + \dots \tag{B.7}$$

Note que termos do tipo $1/n$ ou $1/2n$ sempre são desprezados no limite $n \rightarrow \infty$. Igualando a expressão acima a zero, encontramos $p^* = \sqrt{2n}$.

Resumindo, o máximo de $\ln Q(p)$ ocorre em $p^* = n(x-2)/(x-1)$ para $x > 2$, em $p^* = \sqrt{2n}$ para $x = 2$ e em $p^* = 0$ para $1 < x < 2$.

Levando em consideração o fato de que $\ln Q(p)$ só é apreciável para valores de p próximos a p^* , podemos fazer a seguinte aproximação

$$Q(p) \simeq Q(p^*)e^{-\frac{\kappa}{2}(p-p^*)^2} \quad (\text{B.8})$$

onde $\kappa = \left| \frac{d^2}{dp^2} \ln Q(p) \right|_{p=p^*}$. Isso nos permite fazer a seguinte aproximação

$$R_n(x) \simeq Q(p^*) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\kappa}{2}(p-p^*)^2} dp = \sqrt{\frac{2\pi}{\kappa}} Q(p^*). \quad (\text{B.9})$$

Calculando a segunda derivada de $\ln Q(p)$ obtemos

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dp^2} \ln Q(p) &= \frac{1}{(p-1)^2} - \frac{1}{(n-p+1)^2} + \frac{1/2}{(2n-p)^2} \\ &+ \frac{1}{2n-p} - \frac{1}{n-p} - \frac{1/2}{(n-p)^2}. \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

Se substituirmos $p = p^* = \lambda n$, teremos termos proporcionais a $1/n$ e a $(1/n)^2$, mas para n grande podemos desprezar os termos de ordem $(1/n)^2$ e assim obter

$$\kappa \simeq \frac{1}{n} \left[\frac{1}{2-\lambda} - \frac{1}{1-\lambda} \right]$$

que resulta em

$$\kappa \simeq \frac{(x-1)^2}{nx} \quad (\text{B.11})$$

ao se substituir a expressão (B.6) para λ . Agora vamos assumir $p \gg 1$ e substituir $p = p^* = \lambda n$ em (B.4) para obter

$$\begin{aligned} \ln Q(p^*) &= \ln(\lambda n) - \ln[(1-\lambda)n] + \left[(2-\lambda)n + \frac{1}{2} \right] \ln[(2-\lambda)n] - \left(n + \frac{1}{2} \right) \ln n \\ &- \left[(1-\lambda)n + \frac{1}{2} \right] \ln[(1-\lambda)n] - \frac{1}{2} \ln(2\pi) + \lambda n \ln x. \end{aligned}$$

Note que, antes de substituir $p = p^* = \lambda n$, aproximamos $\ln(p-1) \simeq \ln(p)$ e $\ln(n-p+1) \simeq \ln(n-p)$ para n grande, mas não fizemos a aproximação $(2n-p+1/2) \simeq (2n-p)$ para n grande. A razão é que o termo $(2n-p+1/2)$ se torna o expoente de $(2n-p)$ quando escrevemos $Q(p^*)$ e se fizermos esta aproximação estaremos desprezando o fator multiplicativo $\sqrt{2n-p}$ que é muito maior que a unidade. Pela mesma razão, mantemos os fatores $(n+1/2)$ e

$(n - p + 1/2)$ sem qualquer aproximação. Desenvolvendo mais a expressão acima temos

$$\begin{aligned}
 \ln Q(p^*) &= \ln \lambda - \ln(1 - \lambda) + \frac{1}{2} [\ln(2 - \lambda) - \ln(1 - \lambda) - \ln(2\pi)] \\
 &\quad + \ln n \left[1 - 1 + (2 - \lambda)n + \frac{1}{2} - n - \frac{1}{2} - (1 - \lambda)n - \frac{1}{2} \right] \\
 &\quad + n[(2 - \lambda) \ln(2 - \lambda) - (1 - \lambda) \ln(1 - \lambda) + \lambda \ln x] \\
 &= \ln \lambda + \frac{1}{2} [\ln(2 - \lambda) - 3 \ln(1 - \lambda) - \ln(2\pi)] - \frac{1}{2} \ln n \\
 &\quad + n \left[\ln(2 - \lambda) + (1 - \lambda) \ln \left(\frac{2 - \lambda}{1 - \lambda} \right) + \lambda \ln x \right]. \tag{B.12}
 \end{aligned}$$

Da expressão (B.6) para λ pode-se mostrar que

$$2 - \lambda = \frac{x}{x - 1} \quad \text{e} \quad 1 - \lambda = \frac{1}{x - 1}.$$

Aplicando as expressões acima e a expressão (B.6) em (B.12) obtemos

$$\begin{aligned}
 \ln Q(p^*) &= \ln(x - 2) - \ln(x - 1) + \frac{1}{2} [\ln x - \ln(x - 1) + 3 \ln(x - 1) - \ln(2\pi)] \\
 &\quad - \frac{1}{2} \ln n + n \left[\ln x - \ln(x - 1) + \frac{\ln x}{x - 1} + \frac{x - 2}{x - 1} \ln x \right] \\
 &= \ln(x - 2) - \frac{1}{2} \ln(2\pi n) + (2n + \frac{1}{2}) \ln x - n \ln(x - 1). \tag{B.13}
 \end{aligned}$$

A expressão acima nos dá o valor de $Q(p^*)$. Com $Q(p^*)$ determinado e κ dado por (B.11), podemos voltar para a equação (B.9) e escrever

$$\begin{aligned}
 R_n(x) &= \sqrt{2\pi \frac{nx}{(x - 1)^2}} (x - 2) \sqrt{\frac{1}{2\pi n}} x^{2n+1/2} (x - 1)^{-n} \\
 &= (x - 2) x^{2n+1} (x - 1)^{-n-1}.
 \end{aligned}$$

Note que como $x > 2$ usamos $\sqrt{(x - 1)^2} = (x - 1)$. Lembrando que $x = 1/\beta$ finalmente chegamos a

$$R_n(x) = (1 - 2\beta) \left(\frac{1}{\beta(1 - \beta)} \right)^{n+1} \tag{B.14}$$

com $x > 2$.

No caso $x = 2$, temos de (B.7)

$$\frac{d^2}{dp^2} \ln Q(p) = -\frac{1}{p^2} - \frac{1}{2n} + \dots,$$

Que ao substituir $p^* = \sqrt{2n}$ dá

$$\kappa = 1/n. \tag{B.15}$$

Substituindo $p = p^* = \sqrt{2n}$ em (B.4) temos

$$\begin{aligned} \ln Q(p^*) &= \ln(\sqrt{2n}) - \ln(n) + (2n - p + \frac{1}{2}) \ln(2n) \\ &\quad - (n + \frac{1}{2}) \ln n - (n - p + \frac{1}{2}) \ln(n) - \frac{1}{2} \ln(2\pi) + \sqrt{2n} \ln 2 \end{aligned}$$

que, depois de rearranjar alguns termos, fica

$$\ln Q(p^*) = \ln \left[\frac{2^{2n+1/2}}{\pi^{1/2n}} \right]. \quad (\text{B.16})$$

Substituindo (B.15) e (B.16) em (B.9) obtemos

$$R_n(x=2) = 2 \frac{4^n}{\sqrt{n}}. \quad (\text{B.17})$$

Para $x < 2$, não podemos usar (B.9) pois o valor de p onde $\ln Q(p)$ é máximo está fora da região de soma $2 < p < n$. Mas sabemos que o máximo ocorre em $p^* = 0$. Precisamos adotar uma estratégia diferente. Note que podemos escrever (1.59) da seguinte forma

$$R_n(x) = x^2 \frac{d}{dx} \sum_{p=2}^{n+1} \frac{(2n-p)!}{n!(n+1-p)!} x^{p-1} = x^2 \frac{d}{dx} \sum_{p=0}^n \frac{(2n-1-p)!}{n!(n-p)!} x^p \quad (\text{B.18})$$

onde na segunda igualdade trocamos $p \rightarrow p+1$ e incluímos o termo $p=0$ que é independente de x e, portanto, possui derivada nula.

$$Q_1(p) \equiv \frac{(2n-p-1)!}{n!(n-p)!} x^p = \frac{(2n-p)!}{(2n-p)n!(n-p)!} x^p. \quad (\text{B.19})$$

Para n grande podemos usar a relação de Stirling (B.3) para escrever o logaritmo natural de (B.19) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \ln Q_1(p) &= -\ln(2n-p) + (2n-p + \frac{1}{2}) \ln(2n-p) - (2n-p) + \frac{1}{2} \ln(2\pi) \\ &\quad - (n + \frac{1}{2}) \ln n + n - \frac{1}{2} \ln(2\pi) - (n-p + \frac{1}{2}) \ln(n-p) \\ &\quad + n - p - \frac{1}{2} \ln(2\pi) + p \ln x \\ &= (2n-p - \frac{1}{2}) \ln(2n-p) - (n + \frac{1}{2}) \ln n \\ &\quad - (n-p + \frac{1}{2}) \ln(n-p) - \frac{1}{2} \ln(2\pi) + p \ln x. \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

Note que podemos escrever

$$\begin{aligned} \ln(2n-p) &= \ln 2 + \ln n + \ln \left(1 - \frac{p}{2n} \right) \\ \ln(n-p) &= \ln n + \ln \left(1 - \frac{p}{n} \right) \end{aligned}$$

e aplicar em (B.20) para, depois de alguma álgebra, obter

$$\ln Q_1(p) = n \left\{ \left(2 - \frac{p}{n} - \frac{1}{2n} \right) \ln \left(1 - \frac{p}{2n} \right) - \left(1 - \frac{p}{n} + \frac{1}{2n} \right) \ln \left(1 - \frac{p}{n} \right) \right\} - \frac{3}{2} \ln n - \frac{1}{2} \ln \pi + (2n-1) \ln 2 + p \ln(x/2) \quad (\text{B.21})$$

onde agrupamos separadamente os termos proporcionais a $\ln n$ e os termos proporcionais a $\ln 2$, enquanto agrupamos os termos restantes entre as chaves. Vamos fazer mais uma aproximação na expressão (B.21). Vamos assumir que $p \ll n$ e usar $\ln(1-x) = -x - \frac{x^2}{2} + \dots$ para escrever as seguintes expansões:

$$\begin{aligned} \ln \left(1 - \frac{p}{2n} \right) &\simeq -\frac{p}{2n} - \frac{p^2}{8n^2} + O[(p/n)^3] \\ \ln \left(1 - \frac{p}{n} \right) &\simeq -\frac{p}{n} - \frac{p^2}{2n^2} + O[(p/n)^3] \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

que aplicadas na expressão (B.21) resultam em:

$$\begin{aligned} \ln Q_1(p) &= -\frac{3}{2} \ln n - \frac{1}{2} \ln \pi + (2n-1) \ln 2 + p \ln(x/2) \\ &\quad + n \left\{ -\frac{p^2}{4n^2} + \frac{1}{n} \left[\frac{3p}{4n} + \frac{5p^2}{16n^2} \right] + O(p^3/n^3) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

Note que a expressão acima só é válida para $p \ll n$. E é o que precisamos, pois o valor que maximiza (B.23) para $x < 2$ é $p^* = 0$. Sendo assim podemos estender a soma em (B.18) até infinito, já que somente os termos próximos de $p = 0$ são relevantes, e desprezar os termos em (B.23) que estão entre chaves uma vez que $p \simeq 0$ e n é grande. Com isso podemos escrever

$$\begin{aligned} R_n(x) &\simeq x^2 \frac{d}{dx} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{2^{2n-1}}{n^{3/2} \pi^{1/2}} \left(\frac{x}{2} \right)^p = \frac{4^n}{2n^{3/2} \sqrt{\pi}} x^2 \frac{d}{dx} \sum_{p=0}^{\infty} \left(\frac{x}{2} \right)^p \\ &= \frac{4^n}{2n^{3/2} \sqrt{\pi}} x^2 \frac{d}{dx} \left(1 - \frac{x}{2} \right)^{-1} = \frac{4^n}{\sqrt{\pi} n^{3/2}} (2/x - 1)^{-2}. \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

Referências Bibliográficas

- [1] KRUG, J. *Phys. Rev. Lett.*, v. 67, p. 1882, 1991.
- [2] MACDONALD, J. T.; GIBBS, J. H.; PIPKIN, A. C. *Biopolymers*, v. 6, 1968.
- [3] MACDONALD, J. T.; GIBBS, J. H. *Biopolymers*, v. 7, 1969.
- [4] HEIJNE, G. von; BLOMBERG, C.; LILJENSTRÖM, H. *J. Theor. Biol.*, v. 125, 1987.
- [5] NAGEL, K.; SCHRECKENBERG, M. *J. Physique I*, v. 2, 1992.
- [6] SCHRECKENBERG, M. et al. *Phys. Rev. E.*, v. 51, 1995.
- [7] NAGATANI, T. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 28, 1995.
- [8] LIGGET, T. M. *Interacting particle systems*. New York: Springer, 1985.
- [9] SPOHN, H. *Large scale dynamics of interacting particles*. New York: Springer, 1991.
- [10] SCHÜTZ, G.; DOMANY, E. *J. Stat. Phys.*, v. 72, 1993.
- [11] DERRIDA, B. et al. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 26, p. 1493–1517, 1993.
- [12] SANCHO, J. M. et al. *Phys. Rev. Lett.*, v. 92, p. 250601, 2004.
- [13] KORDA, P. T.; TAYLOR, M. B.; GRIER, D. G. *Phys. Rev. Lett.*, v. 89, p. 128301, 2002.
- [14] MACDONALD, M. P.; SPALDING, G. C.; DHOLAKIA, K. *Nature (London)*, v. 426, p. 421, 2003.
- [15] CHIOU, P. Y.; OHTA, A. T.; WU, M. C. *Nature London*, v. 436, p. 370, 2005.
- [16] LACASTA, A. M. et al. *Phys. Rev. Lett.*, v. 94, p. 160601, 2005.
- [17] ROICHMAN, Y.; WONG, V.; GRIER, D. G. *Physical Review E*, v. 75, p. 011407, 2007.
- [18] DERRIDA, B.; DOMANY, E.; MUKAMEL, D. *J. Stat. Phys.*, v. 69, p. 667–687, 1992.
- [19] LIGGET, T. M. *Trans. Am. Math. Soc.*, v. 213, p. 237, 1975.
- [20] LIGGET, T. M. *Ann. Prob.*, v. 5, p. 795–801, 1977.
- [21] DERRIDA, B.; EVANS, M. R. *J. Physique*, I 3, p. 311–322, 1993.
- [22] FADDEV, L. D. *Sov. Sci. Rev. C*, v. 1, p. 107, 1980.
- [23] BAXTER, R. J. *Exactly solved models in statistical mechanics*. London: Academic Press Inc., 1982.

- [24] HAKIM, V.; NADAL, J. P. *J. Phys. A.: Math. Gen.*, v. 16, p. L213, 1983.
- [25] KLÜMPLER, A.; A.SCHUADSCHNEIDER; ZITTARTZ, J. *J. Phys. A.: Math. Gen.*, v. 25, p. L955, 1991.
- [26] FANNES, M.; NACHTERGAELE, B.; WERNER, R. F. *Commun. Math. Phys.*, v. 144, p. 443, 1992.
- [27] D.ANDJEL, E.; BRAMSON, M.; LIGGET, T. M. *Prob. Theory Rel. Fields*, v. 78, p. 231–247, 1988.
- [28] RISKEN, H. *The Fokker-Planck Equation: Methods of Solution and Applications*. 2. ed. Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 1989.
- [29] EINSTEIN, A. *Ann. Physik*, v. 17, p. 549, 1905.
- [30] TOMÉ, T.; OLIVEIRA, M. J. de. *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*. 1. ed. São Paulo: Edusp, 2001.
- [31] HAKEN, H. *Laser Theory*. Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 1970. (Encyclopedia of Physics, XXV/2c).
- [32] KLEIN, O. *Arkiv for Matematik, Astronomi, och Fysik*, v. 16, n. 5, 1921.
- [33] KRAMERS, H. A. *Physica*, v. 7, p. 284, 1940.
- [34] SMOLUCHOWSKI, M. v. *Ann. Physik*, v. 48, p. 1103, 1915.
- [35] ASHKIN, A. *Phys. Rev. Lett.*, v. 24, p. 156–159, 1970.
- [36] ASHKIN, A. et al. *Opt. Lett.*, v. 11, p. 288, 1986.
- [37] CHU, S. et al. *Phys. Rev. Lett.*, v. 57, p. 314, 1986.
- [38] ASHKIN, A.; DZIEDZIC, J. M.; YAMANE, T. *Nature (London)*, v. 330, p. 769, 1987.
- [39] ASHKIN, A.; DZIEDZIC, J. M. *Science*, v. 235, p. 1517, 1987.
- [40] LANG, M. J.; BLOCK, S. M. *Am. J. Phys.*, v. 71, p. 201, 2003.
- [41] JACKSON, J. D. *Classical Electrodynamics*. 3. ed. [S.l.]: Wiley, 1998.
- [42] ASHKIN, A. (*Academic, San Diego*), v. 55, p. 1–27, 1998.
- [43] ASHKIN, A. *Biophys. J.*, v. 61, p. 569, 1992.
- [44] NEUMAN, K. C.; BLOCKA, S. M. *Review Of Scientific Instruments*, v. 75, n. 9, p. 2787–2809, 2004.
- [45] ZEMANEK, P.; JONAS, A.; LISKA, M. *J. Opt. Soc. Am. A Opt. Image Sci. Vis.*, v. 19, p. 1025, 2002.
- [46] VIANA, N. B. et al. *Phis. Rev. E*, v. 75, p. 021914, 2007.
- [47] KOSS, B. A.; GRIERA, D. G. *Applied Physics Letters*, v. 82, n. 22, p. 3985, 2003.

-
- [48] POTIGUAR, F. Q.; DICKMAN, R. *Phys. Rev. E*, v. 76, p. 031103, 2007.
- [49] LADAVAC, K.; KASZA, K.; GRIER, D. G. *Phys. Rev. E*, v. 70, p. 010901(R), 2004.
- [50] PELTON, M.; LADAVAC, K. *Physical Review E*, v. 70, p. 031108, 2004.
- [51] GOPINATHAN, A.; GRIER, D. G. *Phys. Rev. Lett.*, v. 92, p. 130602, 2004.
- [52] PAINE, P. L.; SCHERR, P. *Biophysical Journal*, v. 15, p. 1087, 1975.