

TESE DE
DOUTORADO

Sistemas Estatísticos Complexos e
Mecânica Estatística Não Extensiva

ANDRÉ MAURICIO CONCEIÇÃO DE SOUZA

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

RIO DE JANEIRO, DEZEMBRO DE 1996

Esta tese é dedicada à *Alexandrina*.

AGRADEÇO

A Constantino Tsallis pela amizade e prestativa orientação.

A José A. Redinz, Francisco Tamarit, Celia Anteneodo, Aglaé Magalhães, Ladário da Silva, Daniel Stariolo, Andres Papa, Crisógono da Silva, Sérgio Curilef, Marcelo Carvalho, pelo apoio, bom ambiente de trabalho e valiosas discussões.

A Silvio Levy, Joana Moraes e Angel Plastino por comunicar-me seus resultados antes de sua publicação.

Aos amigos Luiz Cláudio Vilar e Alexandre Leoni pela amizade, apoio e entusiasmo que foram importantes durante o desenvolvimento do mestrado e doutorado.

Ao professor de primeiro grau Evaldo que me despertou para a beleza da ciência.

A Cláudio Macêdo que me ensinou os passos para ser um cientista.

A Fernanda pela paciência e compreensão pelas horas que não pudemos ficar juntos.

A Alexandrina, José Carlos, Alexandre, Itinha, João, Dorinha, Lídia, Fernando, Maura, Margaré, Teófilo, Helída, Marcos, Livia, Wilson, Rosa, e todas as outras pessoas que fazem parte da minha grande e querida família, que formaram a base do meu caráter, me apoiando durante todas as horas como amigos maravilhosos que são.

Ao CNPq pelo suporte financeiro.

Resumo

Na primeira parte da tese, aplicamos métodos da física estatística a sistemas estatísticos complexos com grande número (N) de constituintes básicos, sem contudo estar no limite termodinâmico propriamente dito. Primeiro, tratamos de um modelo físico, o modelo de Hubbard, para descrever o comportamento dos elétrons π em uma molécula com uma estrutura de bola de futebol com 60 átomos ($N=60$) de carbono chamada de fulereno. Após, estudamos um modelo biológico através da análise dos efeitos de memória dos seus constituintes ($1 \ll N < \infty$), propostos para explicar correlações de longo-alcance encontradas experimentalmente nas cadeias dos ácidos nucleicos (DNA e RNA). Finalmente, utilizando-se de um sistema de N equações não lineares ($N \approx 300$), analisamos um modelo de economia, proposto para explicar o comportamento das flutuações temporais de variáveis ligadas aos sistemas de bolsas de valores.

Na segunda parte da tese, exploramos uma nova formulação que generaliza a mecânica estatística para sistemas não extensivos. Introduzimos as motivações e as principais características da nova teoria e, em seguida, estudamos a superdifusão do tipo Lévy, um fenômeno frequentemente encontrado na natureza. Este tipo de difusão tem sido bastante estudada entretanto, com dificuldades teóricas, via mecânica estatística usual. Utilizando-se da mecânica estatística generalizada, apresentamos uma unificação da difusão normal com a superdifusão do tipo Lévy.

Abstract

In Part I, we apply statistical physics methods in physical and extraphysical areas with a large number (N) of basic components, without thermodynamic limits. First, we study a physical model, the Hubbard model, in order to describe the physical behavior of the π electrons in the fullerene, a soccer-ball structure of 60 carbon atoms ($N=60$). After, we discuss through of the analysis of the memory effects in its components ($1 \ll N < \infty$), a biological model, that we propose for generating “artificial” nucleotide sequences, and, for analyzing the presence of correlation between experimental nucleotide sequences (DNA and RNA). Finally, we introduce a N coupled map lattice model, with $N \approx 300$, to describe time evolution of quantities associated with an economic model, namely, a stock exchange model. In Part II, we discuss some relevant properties of a recently proposed non-extensive thermostatistics, in addition to that, we derive the Lévy-type anomalous superdiffusion, a phenomenon frequently encountered in nature, from generalized statistical mechanics. By so doing, this formalism succeeds where standard statistical mechanics and thermodynamics are known to fail. We exhibit that the generalized statistical mechanics provides an unified picture for both normal and Lévy-like diffusions.

Índice

| | |
|---|----------|
| Folha de rosto | i |
| Dedicatória | iii |
| Agradecimentos | iv |
| Resumo em Português | v |
| Resumo em Inglês | vi |
| Índice | vi |
| Lista de figuras | x |
| Lista de tabelas | xvi |
| | |
| Introdução | 1 |
| | |
| PARTE 1 | 8 |
| | |
| 1 Modelo de Hubbard e Fulereno: Estudo da Estrutura Eletrônica | 9 |
| 1.1 Magnetismo e Modelo de Hubbard | 9 |
| 1.2 O Fulereno | 13 |
| 1.3 Propriedades Magnéticas do Fulereno | 15 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1.3.1 | O Caso de dois Elétrons | 17 |
| 1.3.2 | O Problema de Nagaoka | 23 |
| 1.4 | Conclusões | 27 |
| 2 | Um Modelo para Sequências de Nucleotídeos | 30 |
| 2.1 | Introdução | 30 |
| 2.2 | Os Ácidos Nucléicos | 33 |
| 2.3 | O Modelo | 39 |
| 2.4 | Discussão | 44 |
| 3 | Um Modelo para o Mercado de Ações | 48 |
| 3.1 | Modelos | 50 |
| 3.1.1 | Mercado de uma Empresa | 50 |
| 3.1.2 | Mercado com M Empresas | 60 |
| 3.2 | Conexão Probabilidade-Preço | 63 |
| 3.3 | Conclusões | 69 |
| | PARTE 2 | 72 |
| 4 | Mecânica Estatística Generalizada | 73 |
| 4.1 | Introdução | 73 |
| 4.2 | Mecânica Estatística Generalizada | 75 |
| 4.2.1 | Propriedades da Entropia de Tsallis | 77 |
| 4.2.2 | Aplicações Físicas | 82 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 5 | Difusão Anômala do Tipo Lévy | 86 |
| 5.1 | Introdução | 86 |
| 5.1.1 | Difusão Normal | 87 |
| 5.1.2 | Limites da Difusão Normal | 91 |
| 5.2 | Superdifusão Anômala de Lévy Uni-Dimensional | 93 |
| 5.3 | Superdifusão Anômala de Lévy d-Dimensional | 104 |
| 5.4 | Uma Proposta Experimental | 105 |
| 5.5 | Conclusões | 107 |
| | Conclusão | 110 |
| A | - Apêndice: Distribuições t de Student e r | 112 |
| | Referências | 115 |

Lista de Figuras

| | | |
|-----|---|----|
| 1.1 | Estrutura geométrica do C_{60} | 14 |
| 1.2 | Espectro do modelo de Hubbard com 1 elétron na molécula de fulereno. . . | 16 |
| 1.3 | Espectro de energia do modelo de Hubbard no fulereno com 2 elétrons para $S_Z = 0$ versus U/t | 18 |
| 1.4 | Energias do estado fundamental e dos dois primeiros estados excitados para 2 elétrons como função de U/t | 20 |
| 1.5 | Probabilidade do estado onde os elétrons estão posicionados nos sítios i e j ($ a(r) ^2$) como função da distância linear r (em unidades do comprimento de ligação entre sítios vizinhos) entre i e j | 22 |
| 1.6 | Espectro da molécula de fulereno no limite de forte correlação do modelo de Hubbard com um buraco na banda semi-cheia (3540 níveis de energia para $S_Z = \frac{57}{2}$ e 60 níveis para $S_Z = \frac{59}{2}$). | 24 |

| | | |
|-----|---|----|
| 1.7 | Estado fundamental para o fulereno com 59 elétrons versus $x = t_S/t_D$. Os círculos indicam $S_Z = \frac{57}{2}$ e a curva sólida indica $S_Z = \frac{59}{2}$. Figura interna: diferenças de energia dos estados fundamentais entre $S_Z = \frac{59}{2}$ e $S_Z = \frac{57}{2}$ como função de x . (a) $t_D=1$ e $t_S=x$; (b) $t_D=-1$ e $t_S=-x$ | 25 |
| 2.1 | Estrutura molecular das (a) pentoses (b) bases nitrogenadas. | 34 |
| 2.2 | Estrutura de um tetra desoxirribonucleotídeo. | 35 |
| 2.3 | Estrutura da molécula de DNA. | 37 |
| 2.4 | Deslocamento da caminhada de DNA ($Y(l) \equiv$ excesso de pirimidinas com relação a purinas) em função do comprimento da cadeia de nucleotídeos. (a) Cadeia da miosina β cardíaca humana (nome no GenBank: HUMBM7YH7); (b) sequência artificial gerada com os parâmetros $p=0.85$, $q=0.25$, $\mu=1.65$ e $l_c=6$; (c) cadeia de gene humano (nome no GenBank: HSAT3) e; (d) sequência artificial gerada com os parâmetros $p=0.77$, $q=0.37$, $\mu=1.5$ e $l_c=4$ | 43 |
| 2.5 | Inclinação local da função de flutuação versus o logaritmo da distância ao longo das sequências da Figura anterior. (a) corresponde às sequências a e b; (b) corresponde às sequências c e d. Linhas cheias representam às sequências reais e linhas pontilhadas às artificiais. | 45 |
| 3.1 | Evolução temporal da média da probabilidade da demanda potencial. Modelo recozido sem ruído e $N = 300$, para $\bar{\alpha} = \bar{\beta} = \bar{\gamma}/2 = 1.85$ e $W_\alpha = W_\beta = W_\gamma/2 \equiv W$: (a) $\langle p \rangle(t)$ para $W = 0.2$; (b) $\sigma(t)$ para $W = 0.2$ (círculos cheios) e $W = 0$ (círculos vazios). | 57 |

- 3.2 Evolução temporal do índice de colapso das bolsas de valores $\kappa(t)$. Modelo recozido sem ruído e $N = 300$, para $\bar{\alpha} = \bar{\beta} = \bar{\gamma}/2 = 1.9$ e $W_\alpha = W_\beta = W_\gamma/2 = 0.1$ 58
- 3.3 Valor médio do índice de colapso da bolsa de valores $\bar{\kappa}$ como função da largura $W_\alpha = W_\beta = W_\gamma/2 \equiv W$. $N = 300$ e $\bar{\alpha} = \bar{\beta} = \bar{\gamma}/2 = 1.85$. Representamos ● para recozido sem ruído; ○ para recozido com ruído ($|\eta_i^{(t)}| \leq 0.1$); ▲ temperado sem ruído; △ temperado com ruído ($|\eta_i^{(t)}| \leq 0.1$). 59
- 3.4 Valor médio da demanda potencial para 8 empresas em função da variação temporal. Modelo recozido sem ruído e $N = 100$, para $\bar{\alpha}_l = \bar{\beta}_l = 1.5$, $\bar{\gamma}_l = 3.5$, $\delta_l = 0$ e $W_\alpha = W_\beta = W_\gamma/2 = 0.2$ 61
- 3.5 Valor médio da demanda potencial para 8 empresas em função da variação temporal. Modelo temperado sem ruído e $N = 100$, para $\bar{\alpha}_l = \bar{\beta}_l = 1.0 - 0.1 l$ e $\bar{\gamma}_l = 3.2$. $\bar{\delta}_1 = 0.007$, $\bar{\delta}_l = 0.008$ para $l = 2, 3, 4, 5, 6, 7$, $\bar{\delta}_8 = 0.001$ e $W_\alpha = W_\beta = W_\gamma/2 = 0.02$ 62
- 3.6 Índice de colapso para os modelos de 1 e 8 empresas em função da variação temporal, representados por círculos e triângulos, respectivamente. Os parâmetros para o modelo de 1 empresa são iguais aos da Figura 3.1(a) (círculos cheios) e 3.1(b) (círculos vazios), e para o modelo de 8 empresas são iguais aos da Figura 3.5 (triângulos vazios). 63
- 3.7 Esquema da relação entre preço e as probabilidades de: (a) comprador querer comprar, (b) vendedor querer vender, (c) aproximação usada para p_B , (d) aproximação usada para p_S 64

| | | |
|------|--|----|
| 3.8 | Esquema da relação entre preço e a probabilidade de operação de compra e venda. (a) caso ii, (b) caso iii, (c) caso iv. | 66 |
| 3.9 | Distribuição de preços de um produto. (a) esquema qualitativo, (b) aproximação deste trabalho (Eq. 3.17). | 66 |
| 3.10 | Esquema da relação entre preço médio e a média da probabilidade de operação. | 68 |
| 3.11 | Variação do preço das ações de uma grande empresa. (a) Telebrás na bolsa de valores de São Paulo(em moeda brasileira). (b) Cotação do dolar em relação à moeda brasileira do período. (c) Telebrás na bolsa de valores de São Paulo(em dólares). (d) Modelo de uma bolsa com apenas uma empresa. (e) Modelo de uma bolsa com 8 empresas. Início (dia 0): 1 de julho de 1992. Fim (dia 157): 17 de fevereiro de 1993. Os dados dos gráficos (a) e (b) foram cortesia do Banco Francês e Brasileiro. | 70 |
| 5.1 | Distribuições com $d=1$ ($p_q(x)/\beta^{1/2}$) versus ($\beta^{1/2} x$) para valores típicos de q ($q=1$: Gauss; $q=2$: Lorentz; $q = -\infty$: distribuição delta de Dirac). Figura interna: Valores de $p_q(0)/\beta^{1/2}$ como função de q | 95 |
| 5.2 | Dependência em q para Λ_q com $5/3 < q < 3$. Λ_q tem valor mínimo para $q=2.3199$ correspondente a $\Lambda_q=0.88954$ | 96 |

- 5.3 Dependência de q com $d = 1$ para vários valores de x^2 . $\Delta_q^G \equiv A_q \equiv \beta < x^2 >_1 (N)$ (linha cheia: G representa Gauss); $B_q \equiv \beta < x^2 >_q (1)$ ($B_1 = 1/2$, $B_2 = 1/2\pi$ e B_q atinge seu valor máximo 0.6713 para $q \simeq -0.21$); $C_q^G \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \beta/(N)^{\frac{3-q}{2}} < x^2 >_q (N)$; $\Delta_q^L \equiv D_q \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \beta/(N)^{q-1} < x^2 >_q (N)$ (linha tracejada; L representa Lévy). Ambos Δ_q^G e Δ_q^L divergem em $q = 5/3$. Alguns pontos típicos também são indicados: $\beta/(2)^{3/2} < x^2 >_0 (2)$ para $q = 0$; $\beta/(2)^{5/4} < x^2 >_{1/2} (2)$ para $q = 1/2$; $\beta/(2)^{9/10} < x^2 >_{6/5} (2)$ para $q = 6/5$; $\beta/(2)^{3/4} < x^2 >_{3/2} (2)$, $\beta/(3)^{3/4} < x^2 >_{3/2} (3)$ e $\beta/(4)^{3/4} < x^2 >_{3/2} (4)$ para $q = 3/2$; $\beta/(2)^{2/3} < x^2 >_{5/3} (2)$ e $\beta/(3)^{2/3} < x^2 >_{5/3} (3)$ para $q = 5/3$; $\beta/(2)^{4/5} < x^2 >_{9/5} (2)$ para $q = 9/5$; $\beta/(2)^{6/5} < x^2 >_{11/5} (2)$ para $q = 11/5$. Observemos que $(\beta/N) < x^2 >_1 (N) = 1/2$ e $(\beta/N) < x^2 >_2 (N) = 1/2\pi$ para todos valores de N , e também que $(\beta/N) < x^2 >_1 (N)$ diverge para $q \geq 5/3$ para todos valores de N e que $\lim_{N \rightarrow \infty} \beta/(N)^{\frac{3-q}{2}} < x^2 >_q (N)$ diverge para $q \leq 0$ 97
- 5.4 Dependência em q para $d = 1$ de: (a) γ (x escala como $N^{1/\gamma(q)}$ para $N \gg 1$); (b) δ ($< x^2 >_q \propto TN^{\delta(q)}$, para $N \gg 1$; $\delta(q)$ é igual a $(3-q)/2$ se $q \leq 5/3$ e igual a $(q - 1)$ para $q \geq 5/3$; q^* representa o atrator que é igual a 1 se $q < 5/3$ e q se $q > 5/3$). 100
- 5.5 $p_q(x, N)$ para casos típicos. Linhas cheias representam o caso $N=1$, e linhas tracejadas representam o caso $N \rightarrow \infty$ 102

- 5.6 Reescala de N para $p_q(x, N)$ com $q=3/2$: $p_{3/2}(\beta^{1/2}x, 1)/\beta^{1/2} = \frac{4(2)^{1/2}}{\pi} \frac{1}{(2+\theta x^2)^2}$.
 $2^{1/2}p_{3/2}(\beta^{1/2}x, 2)/\beta^{1/2} = \frac{64}{\pi} \frac{\theta x^2 + 80}{(\theta x^2 + 16)^3}$. $\lim_{N \rightarrow \infty} N^{1/2} p_{3/2}(\beta^{1/2}x, N)/\beta^{1/2} = \frac{1}{\pi^{1/2}}$
 $e^{-\beta x^2}$ (para todos os valores de $q < 5/3$, a reescala da largura $\langle x^2 \rangle_1$ é preservada com o aumento de N ; os pontos foram obtidos através de simulação computacional para $N=100$). 103
- 5.7 (q,d)-Dependência de γ : (a) γ versus q para valores típicos de d ; (b) γ versus $Q \equiv 1 - \frac{d(4+d)}{2} + \frac{d(2+d)}{2}q$ (observar que no limite $d \rightarrow \infty$ temos $\gamma = 3 - Q$ para $Q > 1$); $Q=2$ implica que $\gamma = d/(1+d)$; (c) d-dependência de q_{max} , q_L e q_c 106
- 5.8 Coeficientes de difusão D_q^G e D_q^L para $-1 < q < 3$. Para $q \rightarrow \frac{5}{3} + 0$ temos $D_q^L \sim 0.1211(q - \frac{5}{3})^{-2/3}$. Para $q \rightarrow \frac{5}{3} - 0$ temos $D_q^G \sim \frac{1}{3}(\frac{5}{3} - q)^{-1}$ 109

Lista de Tabelas

| | | |
|-----|--|----|
| 1.1 | Estado fundamental do modelo de Hubbard para o fulereno com 59 elétrons, $S_Z = \frac{57}{2}$ e $S_Z = \frac{59}{2}$. As energias são dadas em unidades de energia de salto dos elétrons (t). | 27 |
| 1.2 | Conjectura sobre o magnetismo do fulereno no limite de forte acoplamento eletrônico. | 29 |
| 2.1 | Composição em bases de DNA de diferentes espécies (%). | 36 |

Introdução

A mecânica estatística trata do comportamento de sistemas mecânicos quando o nosso conhecimento das condições do sistema é menor que o conhecimento máximo que pode ser possível teoricamente. Permite-nos fazer predições das condições futuras do sistema, partindo do conhecimento incompleto do estado inicial[1].

A mecânica estatística pode ser fundamentada nos métodos dedutivo e indutivo. A introdução da mecânica estatística dedutiva é obtida fazendo um estudo preliminar no sistema de interesse e introduzindo postulados que permitam calcular o seu comportamento. Na indução a mecânica estatística é obtida através do estudo do comportamento em muitos exemplos da situação de interesse, e em seguida codificando o resultado para fazer uso em predições futuras.

O desenvolvimento atual da mecânica estatística tem sido ao longo do método dedutivo. Com base na mecânica usual (quântica ou clássica) foram introduzidos postulados que permitem computar resultados de médias que devem ser esperadas na experimentação.

Historicamente a mecânica estatística tem tratado de sistemas compostos de um gran-

de número de moléculas de difícil tratamento através da mecânica usual. A mecânica estatística considera o comportamento médio de um conjunto de sistemas (“ensemble”) de mesma estrutura, mas distribuídos sobre um intervalo de diferentes estados possíveis.

Foi através de Newton e Bernoulli, entre outros, que no século XVIII fenômenos relacionados com a teoria dos gases passaram a ser explicados através do movimento de moléculas. Entretanto, só a partir da segunda metade do século XIX os problemas passaram a ser respondidos de maneira satisfatória para a ciência. Foi neste momento que a mecânica estatística nasceu como ciência.

Em 1857, R. Clausius apresentou a interpretação da energia térmica como sendo a energia cinética do movimento desordenado das moléculas. Em 1859, Maxwell estabeleceu a lei que obedece a distribuição das moléculas num gás. O grande desenvolvimento subsequente da mecânica estatística deveu-se a Ludwig Boltzmann. A idéia inicial de Boltzmann foi a hipótese atômica. Na época, fim do século XIX, a estrutura atômica não tinha sido demonstrada e por isso Boltzmann sofreu muitos ataques da comunidade científica que não aceitava a idéia da matéria ser constituída de um grande número de pequenas “bolinhas” que se chocavam umas com as outras. Boltzmann usou a termodinâmica como ponto de partida para sua nova teoria. Ele procurou compreendê-la dentro da hipótese atômica. Um outro passo importante foi a elucidação do sentido probabilístico da entropia. A entropia passou a ser uma das bases da nova ciência. Contemporâneo de Boltzmann, J. Willard Gibbs justificou o uso da mecânica estatística não somente para os gases, que até então era a base dos estudos, mas também para um sistema arbitrário.

Com a comprovação da matéria ser composta de átomos e a sua verificação experi-

mental, as idéias de Boltzmann tornaram-se aceitas pela comunidade científica . Devemos observar que as idéias de Boltzmann sobre os átomos não são totalmente verdadeiras para a ciência atual, mas foram importantes naquela etapa de evolução da mecânica estatística.

Juntando as novas idéias da mecânica estatística com as novas realidades do mundo microscópico que estavam sendo desvendadas, outros pesquisadores transformaram a mecânica estatística numa das mais importantes teorias da física moderna, adquirindo uma grande capacidade de predição. A mecânica estatística é utilizada com sucesso nos mais diversos domínios da física. Os fenômenos termodinâmicos, as propriedades dielétricas, o magnetismo, condutividade elétrica, a difusão da luz, e muitos outros são explicados pela física estatística molecular. Em cada um dos domínios das ciências são inúmeras as aplicações da mecânica estatística e seu crescimento é notado a cada dia.

Boltzmann e Gibbs foram os pilares da nova ciência. Tão importante quanto as outras grandes descobertas da física, ela estabeleceu novas relações e criou novos conceitos, utilizando-se de modelos pré-existentes. Contudo, como toda teoria científica, a mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs tem limites de aplicabilidade. Como já observamos, por utilizar-se principalmente do método dedutivo, a teoria da mecânica estatística foi baseada em postulados, que por definição devem ter restrições no seu uso. Hoje, mesmo sendo utilizada em inúmeros sistemas físicos, a mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs falha na explicação de uma grande quantidade de fenômenos. Neste ponto, podemos considerar que o problema está no modelo utilizado, ou considerar que o problema está na mecânica estatística utilizada. Acreditamos que, dependendo do caso, podemos encontrar sistemas que não devem ter modelos satisfatórios e outros sistemas, que ferem os postula-

dos da mecânica estatística usual, que deverão ser analisados por uma nova formulação da mecânica estatística. Como parte desse trabalho discutiremos os limites de aplicabilidade da mecânica estatística usual e apresentaremos uma generalização da mecânica estatística proposta recentemente por Tsallis[2].

O esquema geral de desenvolvimento desta tese será feito em *duas partes*.

A *primeira parte* será dedicada ao estudo de sistemas estatísticos complexos com grande número (N) de constituintes básicos, sem contudo estar no limite termodinâmico propriamente dito ($1 \ll N \ll \infty$).

Na *segunda parte* da tese exploraremos a nova formulação que generaliza a mecânica estatística para sistemas não extensivos, suas motivações, principais características e aplicações .

A seguir, descreveremos os capítulos desenvolvidos, justificando a importância e a escolha dos assuntos expostos. Cada capítulo tem sua própria introdução onde o assunto tratado é apresentado com maior especificidade.

O sucesso da mecânica estatística quântica em interpretar e confirmar os resultados experimentais de diversas medidas de grandezas dos materiais, principalmente do estado sólido, atraiu um grande número de físicos teóricos para este ramo da ciência. Vários modelos foram apresentados para explicar os fenômenos ditos cooperativos, dentre eles, o magnetismo.

O magnetismo é um dos fenômenos mais explorados pela mecânica estatística[3, 4, 5]. Inclusive, através de seu estudo, muitas técnicas foram criadas, fazendo aumentar o entendimento tanto deste fenômeno quanto da própria mecânica estatística[6]. Um dos modelos magnéticos mais importantes é o chamado modelo de Hubbard[7], usado em sistemas de elétrons itinerantes, como o ferro, níquel e cobalto. Dentro do espírito de apresentar aplicações da mecânica estatística, no capítulo I iremos aplicar o modelo de Hubbard para investigar algumas propriedades da estrutura eletrônica da molécula de fulereno, que é a molécula base de uma nova estrutura de carbono recentemente sintetizada. Começaremos por explicar o que é o fulereno e porque é um sistema de elétrons itinerantes. Em seguida, usaremos o método de diagonalização direta de matrizes para investigar as propriedades da molécula com dois elétrons e no caso da banda semi-cheia com a presença de um buraco. Finalmente faremos a análise e as conclusões dos resultados, sempre que possível comparando-os com dados experimentais[8, 9].

Por ser uma teoria baseada no comportamento de um grande número de partículas, a mecânica estatística também vem sendo utilizada em outros ramos das ciências, além da física. São inúmeros trabalhos de físicos nas ciências biológicas, atmosféricas, na música, na economia, etc[10]. Para isso, são aplicadas ferramentas usadas na mecânica estatística e são criados modelos que se propõem explicar os fenômenos encontrados. Os físicos os chamam de fenômenos complexos.

No capítulo II, baseados num protótipo para estudos de efeitos de memória[11, 12], apresentaremos um modelo proposto para explicar correlações de longo-alcance encontradas nas cadeias dos ácidos nucleicos (DNA e RNA) [13]. Aplicaremos como ferramenta a

chamada “caminhada aleatória do DNA” [14], que considera os nucleotídeos como variável binária e aplica a técnica usada na caminhada aleatória usual estudada na estatística. Faremos uma comparação entre os resultados do nosso modelo e os resultados experimentais obtidos através do GENBANK (via internet), que é um banco de dados de genes já decodificados.

Na sequência, capítulo III, ainda com base nos fenômenos complexos, construiremos um modelo para explicar o comportamento de variáveis ligadas aos sistemas de bolsas de valores, no qual aplicaremos um sistema de equações acopladas para conectar corretores, e entender alguns fenômenos interessantes que constantemente ocorrem nas bolsas [15]. É importante ressaltar que nosso modelo não prevê uma série temporal de uma companhia real, mas gera uma série temporal teórica para que possamos analisar seu comportamento, comparando e tentando entender as respostas de um mercado real.

Após aplicar a mecânica estatística a fenômenos físicos (capítulo I) e a fenômenos biológicos (capítulo II) e econômicos (capítulo III), apresentaremos a generalização da mecânica estatística proposta por Tsallis. Comumente, é difícil encontrarmos nos livros de mecânica estatística os limites de aplicabilidade da teoria. Entretanto, grande parte dos fenômenos físicos, e de outras ciências em geral, não são possíveis de serem resolvidos via mecânica estatística usual, a chamada mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs. No capítulo IV iremos apresentar os limites da teoria usual e exemplificaremos alguns dos sistemas onde ela não se aplica. Continuando, introduziremos a nova proposta de Tsallis, mostrando algumas de suas propriedades e aplicações.

No capítulo V, aplicaremos a mecânica estatística generalizada para estudar difusões

anômalas, conhecidas por violar as leis da difusão normal baseada na mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs e estudada por Einstein através do movimento Browniano[16]. Mais precisamente, estudaremos a chamada difusão anômala tipo Lévy, que apresenta distribuições para a posição das partículas na forma de lei de potências (para grandes valores da posição) em oposição a forma exponencial obtida via difusão normal. Modernamente, este tipo de difusão tem sido bastante estudada, entretanto com dificuldades teóricas na obtenção da forma da distribuição via mecânica estatística usual. Nossos resultados apresentam uma unificação dos dois tipos de difusão através da mesma técnica usualmente utilizada na obtenção da difusão normal, mas, usando a mecânica estatística generalizada[17, 18].

Finalmente, no capítulo VI faremos nossas conclusões e algumas propostas de continuidade dos trabalhos apresentados.

PARTE 1

Capítulo 1

Modelo de Hubbard e Fulereo: Estudo da Estrutura Eletrônica

1.1 Magnetismo e Modelo de Hubbard

Apesar de ser um fenômeno conhecido desde a Grécia antiga, o magnetismo, manifestado de diversas formas (tais como: ferro-, antiferro-, para-, dia-, ferri-,etc magnetismo), apresenta dificuldades teóricas que duram até os nossos dias. Por exemplo, o ferro, o mais comum dos materiais magnéticos, tem sido objeto de controvérsias desde as primeiras pesquisas até a moderna teoria do magnetismo fundamentada na mecânica quântica[3, 19, 20].

O estudo sistemático das propriedades térmicas das substâncias magnéticas começou no final do século passado com Pierre Curie. Ele encontrou que a magnetização se-

ria proporcional ao campo magnético aplicado. Seus estudos sobre a susceptibilidade magnética criaram leis gerais para a teoria que foram de grande importância para o interesse desta área de pesquisa. Para explicar teoricamente seus resultados, Langevin[21] criou a hipótese dos momentos magnéticos locais e em seguida Pierre Weiss[22] idealizou a hipótese do campo molecular que seria exercido sobre cada momento local, proporcional à magnetização total do sistema.

A teoria quântica, associando os momentos locais aos átomos, foi apresentada por Heisenberg[23], que introduziu a interação de troca para acoplar os momentos locais.

Estudos subsequentes baseados no modelo de Heisenberg, e suas generalizações, avançaram enormemente o entendimento do magnetismo e a teoria de transições de fases. Podemos citar a célebre solução do modelo de Ising[24] (a ele sugerido pelo seu orientador Lenz) para a rede quadrada feita por Onsager em 1944[25].

Entretanto, esses modelos não são apropriados para descrever o magnetismo dos metais de transição, como o ferro, cobalto e níquel, onde os elétrons responsáveis pelo magnetismo são considerados itinerantes, pois possuem distribuição não local de momentos atômicos.

A linha do magnetismo de elétrons itinerantes foi inicialmente desenvolvida com o uso da aproximação de campo médio para a interação elétron-elétron, por Stoner[26] e Slater[27], baseada na teoria de bandas de Bloch[28]. O uso da teoria de campo médio na maior parte das teorias modernas de sólidos tem sido extremamente útil. Entretanto, algumas das propriedades do ferromagnetismo dos metais de transição não são explicadas. Inclusive, algumas das propriedades são mais bem explicadas usando modelos localizados, como o modelo de Heisenberg.

No caminho de encontrar uma teoria que unificasse os mecanismos de criação de ordem magnética dos modelos localizados e itinerantes, surgiram várias propostas, tais como as de Van Vleck[29], Anderson[30] e Hubbard[7].

O modelo de Hubbard descreve conceitualmente o comportamento de elétrons de condução em bandas, correlacionando-os através da repulsão Coulombiana de curto alcance.

O Hamiltoniano do modelo de Hubbard pode ser escrito como:

$$H = \sum_{\langle ij \rangle \alpha} t_{ij} (c_{i\alpha}^\dagger c_{j\alpha} + hc) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1.1)$$

onde $c_{i\alpha}^\dagger$, $c_{i\alpha}$ e $n_{i\alpha} \equiv c_{i\alpha}^\dagger c_{i\alpha}$ são, respectivamente, os operadores de criação, destruição e número de elétrons com spin α no orbital localizado no sítio i ; a soma $\langle ij \rangle$ está definida sobre os sítios na rede que são primeiros vizinhos; t_{ij} é a integral de hopping e normalmente é tida como:

$$t_{ij} = -t \quad (\text{com } t > 0). \quad (1.2)$$

O problema do ferromagnetismo no modelo de Hubbard, ainda que tenha sido proposto há mais de trinta anos, e esteja sendo investigado por um grande número de pesquisadores em todo o mundo, tem poucos resultados exatos conhecidos.

A maior parte das predições de fases ferromagnéticas está sendo encontrada na região do limite de forte correlação eletrônica. Neste caso, se a banda é semi-cheia, o modelo pode ser mapeado no modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin $\frac{1}{2}$ com acoplamento $J = 4t^2/U$. A partir de resultados do modelo de Heisenberg, conclui-se que o estado

ferromagnético com spin total máximo nunca é o estado fundamental para a banda meio-cheia.

Considerando a banda diferente de meio-cheia, Nagaoka[31] provou que para redes bipartidas, com U infinito e um buraco, o estado ferromagnético com spin total máximo é o estado fundamental do modelo. Entretanto, para uma fração finita de buracos na banda meio-cheia, a questão permanece sem solução. Em particular, na rede quadrada, Shastry et al.[32] mostraram que, para uma fração de buracos menor que 0.49, o estado ferromagnético completamente alinhado não é o estado fundamental do modelo. Em seu trabalho, Nagaoka classificou dois casos de estruturas cristalinas: (A) estruturas bipartidas: ele demonstrou que o ferromagnetismo é esperado. (B) estruturas antiferromagneticamente frustradas: ele demonstrou que o ferromagnetismo é esperado apenas se admitirmos que $t < 0$, ou, se ao invés de um buraco na banda meio-cheia, considerarmos o caso do excesso de um elétron na banda meio-cheia e $t > 0$.

Takahashi calculou numericamente os estados fundamentais para o limite de $U = \infty$ como função do número de elétrons e do spin total para diversas redes[33]. Ele também classificou as redes em dois tipos como Nagaoka, sendo seus resultados consistentes com o teorema de Nagaoka.

Uma importante consequência do sucesso do modelo de Hubbard tem sido sua aplicação a diversos problemas eletrônicos. Tradicionalmente usado em magnetismo de metais, este modelo tem sido usado para esclarecer, por exemplo, a supercondutividade a altas temperaturas dos materiais a base de Cobre[34], e as propriedades magnéticas de estruturas orgânicas[35].

1.2 O Fulereno

Recentemente, uma estrutura de 60 átomos de Carbono em forma de uma bola de futebol foi caracterizada experimentalmente como uma molécula estável[36]. Esta descoberta atraiu imediatamente grande atenção a esta área de pesquisa. Em 1990 foi produzido em laboratório o sólido cristalino composto de agregados destas moléculas[37]. Esta é a terceira forma sólida do Carbono puro (as outras duas sendo grafite e diamante). A nova classe de moléculas de Carbono passou a ser chamada de fulereno, em homenagem ao engenheiro e filósofo R. Buckminster Fuller, que estudou os princípios da arquitetura em geodésicas. Em especial, pela estrutura perfeitamente simétrica e pela sua maior abundância, o C_{60} foi chamado de “Buckminsterfullerene”. Ou ainda, de forma mais curta, de “buckball”, ou mesmo de fulereno. por melhor representar a nova classe de moléculas.

Suas propriedades magnéticas e eletrônicas são hoje um desafio tanto para pesquisadores teóricos como para experimentais.

Novas formas de moléculas de fulereno têm sido produzidas. como conjuntos de átomos de carbonos com estruturas do tipo esférica, tubular, capsular, etc[38], com interessantes possibilidades de aplicações , em lubrificantes, cápsula protetora de reações moleculares e fibras. Supercondutividade a relativamente altas temperaturas é observada quando estes materiais são dopados com metais alcalinos (por exemplo, 28 K para o Rb_3C_{60})[39].

O C_{60} (Fig. 1.1) tem átomos de Carbono situados num icosaedro com 60 sítios, 90 ligações e 32 faces (20 hexágonos e 12 pentágonos). Cada átomo de Carbono está ligado

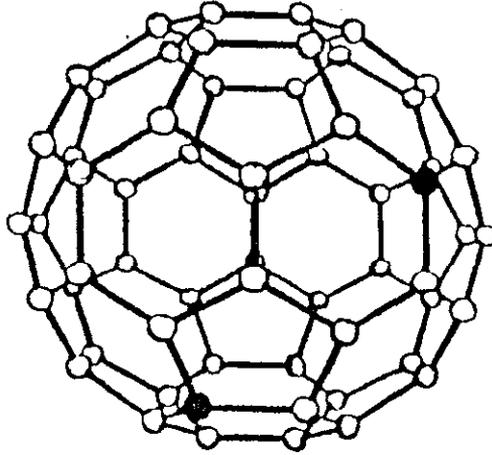


Figura 1.1: Estrutura geométrica do C_{60} .

a outros três átomos. Duas delas são ligações simples (orbital σ) de aproximadamente 1.46 \AA , e há um pentágono e um hexágono contíguos entre eles. A outra ponte carbono-carbono tem uma ligação dupla (orbitais σ e π) com comprimento aproximado de 1.40 \AA , e está entre dois hexágonos. Cada átomo tem quatro elétrons de valência e ao todo a molécula tem 240 elétrons de valência, onde 180 são elétrons em orbitais σ e 60 são em orbitais π .

Os elétrons da banda discreta de estados tipo σ são bastante estáveis em cada átomo e os elétrons da banda tipo π podem ser transferidos entre os sítios na molécula[40]. Esses elétrons π são fortemente correlacionados e de crucial importância na estrutura eletrônica do material. Os elétrons π e σ podem ser tratados independentemente, pois a integral de overlap entre os orbitais π e σ é desprezível[40, 41, 42]. A forte correlação eletrônica entre os elétrons π é fundamentada na formação da banda π deslocalizada.

Hoje já se conhece que os elétrons π do fulereno formam uma banda deslocalizada[40]. Vários autores sugerem que o modelo de Hubbard pode explicar o comportamento físico dos elétrons π de uma grande classe de estruturas de carbono, tais como oligômeros e polímeros[35], como também no caso para o fulereno[41, 43].

1.3 Propriedades Magnéticas do Fulereno

A aproximação de elétrons livres foi uma das primeiras propostas para explicar as características da estrutura eletrônica das moléculas de fulereno[42]. Contudo, foi observada a existência de uma repulsão Coulombiana intra-sítio para o C_{60} . Seu valor é de aproximadamente 9 eV , enquanto que a energia de salto de elétrons entre sítios vizinhos varia em torno de 2 a 3 eV [41], dando $U/t \approx 3$ a 5 (valores precisos não são conhecidos). Isso sugere que não podemos tratar simplesmente o C_{60} no quadro de elétrons livres sem exigir cuidados relativos à correlação eletrônica. A aproximação de elétrons livres tem sido aplicada no estudo da estabilidade de fulerenos desde 10 a 2940 átomos[44].

Alguns autores sugerem que o modelo de Hubbard possa explicar o comportamento físico dos elétrons π [35], como também da estrutura eletrônica nos fulerenos.[41, 43]

Para o modelo de Hubbard no C_{60} existem evidências de que a correlação dos spins para um valor intermediário de U/t seja qualitativamente similar, mas de menor magnitude, ao caso de U/t grande. Ainda, existem evidências de que não há nada análogo a uma transição de fase para o modelo como função de U/t [45]. Assim, é plausível que o limite $U = \infty$ seja uma melhor aproximação para o C_{60} que o limite $U = 0$.

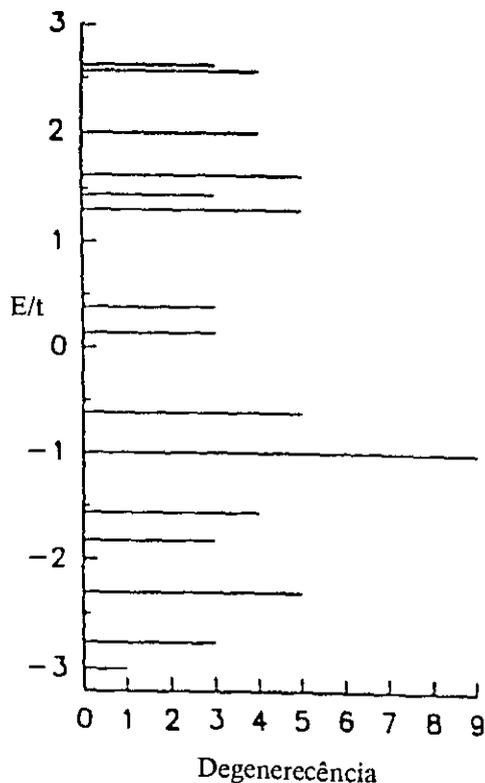


Figura 1.2: Espectro do modelo de Hubbard com 1 elétron na molécula de fulereno.

O caso de valores intermediários de U/t foi estudado via teoria de perturbação para a molécula de fulereno quando dopada com elétrons[41]. A energia “pair-binding” foi dada como função de U/t . Uma efetiva interação atrativa entre os elétrons foi obtida, indicando a possibilidade de supercondutividade dentro da teoria RVB[34]. A possibilidade de estabilização do ferromagnetismo também foi indicada para diferentes tipos de dopantes do C_{60} . Observemos que o ferromagnetismo é baseado na interação elétron-elétron, que distingue-se do mecanismo para a supercondutividade baseado na interação elétron-fônon.

O método de Monte Carlo também já foi usado para $U/t = 4$ e 8, e no estudo de onda de spin no limite $U/t \rightarrow \infty$, na banda semi-cheia da molécula de C_{60} [43]. Encontrou-se que o comprimento de correlação dos spins do estado fundamental deve ser menor que o tamanho da molécula, sugerindo um tipo de “desordem de spin”.

Podemos observar que a estimativa da interação efetiva intra-sítios entre os elétrons

(U) é de fundamental importância no comportamento magnético dos fulerenos, dentro do contexto do modelo de Hubbard. O tipo de dopante define a interação efetiva e consequentemente a possibilidade de ferromagnetismo. É importante salientar que a estrutura topológica da rede é fundamental para as propriedades magnéticas.

1.3.1 O Caso de dois Elétrons

A interação entre elétrons (e buracos) no modelo de Hubbard é de grande interesse no entendimento de sistemas de forte correlação eletrônica (por exemplo, supercondutividade a alta- T_c). A interação entre dois elétrons é o primeiro degrau para o entendimento desse problema. O caso de dois elétrons no modelo de Hubbard já foi estudado antes. Inicialmente, Hubbard[7] encontrou o espectro de energia. Mais recentemente, a dependência da conectividade topológica dos átomos numa rede de Bravais foi mais esclarecida[46]; a função de correlação do par de elétrons foi encontrada para o caso unidimensional e para a rede quadrada[47].

No nosso trabalho, resolvemos exatamente o problema de dois elétrons no modelo de Hubbard para a molécula de fulereno[8]. Esse limite foi motivado pela possibilidade de solução e pela possibilidade de estudar os efeitos da repulsão Coulombiana entre os elétrons.

Admitimos $t_{ij} = -t$. Como $S_Z = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{60} (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})$ comuta com o Hamiltoniano da Eq. (1.1) podemos considerar separadamente os casos $S_Z = \pm 1$ e $S_Z = 0$. Os casos $S_Z = \pm 1$ são trivialmente obtidos através do espectro de um elétron, devido ao princípio de exclusão de Pauli (inserido no segundo termo da Eq. (1.1)). Os dois elétrons são

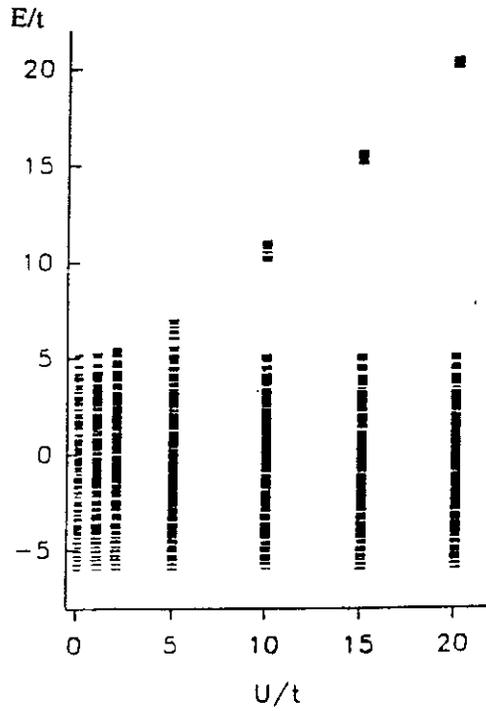


Figura 1.3: Espectro de energia do modelo de Hubbard no fulereno com 2 elétrons para $S_z = 0$ versus U/t .

independentes e não envolvem o termo em U . O espectro de energia é dado por:

$$E^{(2)} = E_i^{(1)} + E_j^{(1)} \quad (1.3)$$

onde $i \neq j$ e $E_i^{(1)}$ é o i -ésimo nível de energia do espectro de um elétron (Fig. 1.2).

Os níveis de energia para o caso $S_z = 0$ foram obtidos numericamente pela diagonalização direta da matriz do Hamiltoniano (3600×3600). Usamos algumas simetrias do C_{60} para reduzir a dimensionalidade da matriz por um fator aproximado de 4. O espectro é mostrado na Fig. 1.3 como função dos valores de U/t . Podemos ver que aparecem duas bandas se U aumenta. A diferença de energia entre as bandas (Δ) foi inferida, como função de U/t , através de um ajuste polinomial entre a diferença do mais baixo nível de energia da banda mais alta e o mais alto nível de energia da banda mais baixa. Os

termos não lineares do ajuste polinomial são sempre desprezíveis quando comparados com o termo linear. Por exemplo, o melhor ajuste de um polinômio de segunda ordem foi,

$$\Delta = -5.11 + 0.998\left(\frac{U}{t}\right) + 1.55 \times 10^{-5}\left(\frac{U}{t}\right)^2 \quad (1.4)$$

onde $\frac{U}{t} > 5$.

Podemos concluir que Δ praticamente aumenta *linearmente* com U/t . É possível definir uma repulsão crítica $U^* = 5.11t$ na qual para $U \leq U^*$ existe apenas uma banda. Com base na teoria de Mott[48], espera-se que Δ se anule para $U^c/W \approx 1$, onde $W = 2zt$ é a largura de banda, e z é o número de coordenação da rede. Encontramos que Δ anula-se em $U^* \approx U^c \approx W = 6t$. Assim, o comportamento do Δ ajusta-se ao comportamento de Mott quando $\Delta \approx U - W'$, com $W' \approx U^*$.

No caso de t positivo, o estado fundamental é sempre não degenerado e singleto com relação ao spin. Se considerarmos o termo de energia de salto como positivo ($t \rightarrow -|t|$), encontramos que o estado fundamental é do tipo spin tripleto. Esses resultados são esperados para redes não bipartidas [46]. Na Fig. 1.4 nós mostramos o estado fundamental e os dois primeiros estados excitados de energia versus U/t . A energia do primeiro estado excitado para $S_Z = 0$ é igual à energia do estado fundamental para $S_Z = \pm 1$. No limite de acoplamento infinito, considerando a energia de salto positiva, o modelo estabiliza o estado ferromagnético ($E_0 = -5.2361$, $S_Z = \pm 1$) e considerando a energia de salto negativa o modelo estabiliza o estado paramagnético ($E_0 = -5.9502$, $S_Z = 0$).

Simetria de partícula-buraco pode ser aplicada ao modelo através da transformação

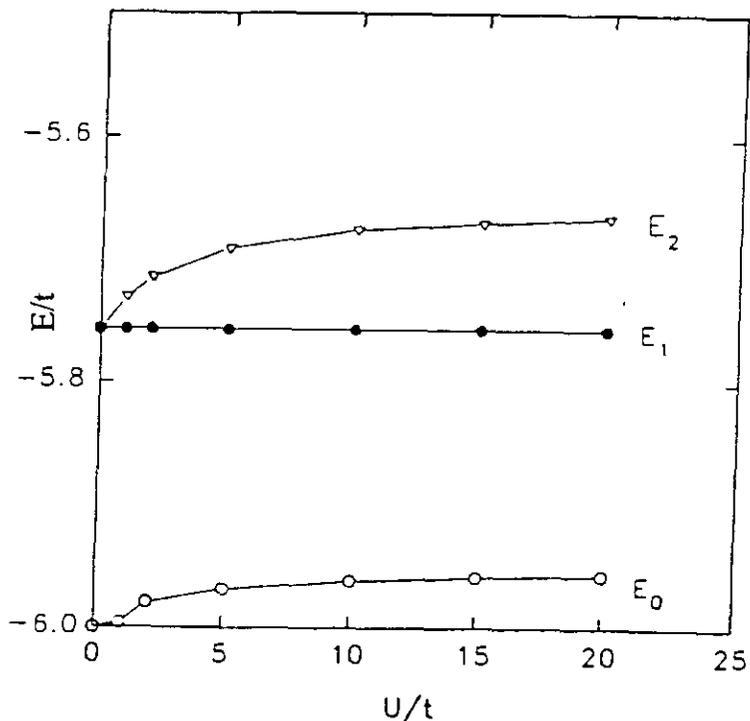


Figura 1.4: Energias do estado fundamental e dos dois primeiros estados excitados para 2 elétrons como função de U/t .

$c_{i\alpha}^\dagger \rightarrow c_{i\alpha}$ e $c_{i\alpha} \rightarrow c_{i\alpha}^\dagger$. Portanto, podemos relacionar o caso de duas partículas com o problema de dois buracos na banda completa com o sinal trocado para matriz de energia de salto. Assim, podemos analisar a dopagem eletrônica acima da banda meio-cheia, como um caso idêntico a dopagem de buracos abaixo da banda semi-cheia com o sinal invertido para a matriz de salto.

Escrevemos a função de onda do estado fundamental como,

$$|\Psi_0\rangle = \sum_{i=1}^{60} \sum_{j=1}^{60} a(i, j) c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger |vacuo\rangle. \quad (1.5)$$

onde os coeficientes $a(i, j)$ obedecem o vínculo

$$\sum_{i=1}^{60} \sum_{j=1}^{60} |a(i, j)|^2 = 1 \quad (1.6)$$

e $|a(i, j)|^2$ representa a probabilidade do estado no qual existem elétrons nos sítios de posições \vec{R}_i e \vec{R}_j . Se considerarmos a distância linear entre i e j igual a $r \equiv (|\vec{R}_i - \vec{R}_j|)$ podemos ver facilmente da simetria do problema que

$$a(i, j) \equiv a(r). \quad (1.7)$$

Na Fig. 1.5 apresentamos a probabilidade ($|a(r)|^2$) do estado onde os elétrons estão nos sítios i e j com distância linear r como função de r/b . Aqui, b é o comprimento da ligação entre sítios vizinhos. De fato, as ligações nos pentágonos são maiores que as ligações fora dos pentágonos (razão de 1.04), então deveremos ter diferentes energias de salto t_{ij} . Entretanto, consideraremos aqui a estrutura como um icosaedro perfeito onde todas as ligações carbono-carbono são equivalentes. Na próxima seção veremos que para outro caso particular do modelo em questão, considerar um ou dois tipos de energia de salto não cria diferença qualitativa no comportamento magnético para o C_{60} . É válido lembrar que esta consideração é feita apenas para o comportamento do sistema elétron-elétron. Se analisarmos a interação elétron-fônon, a estrutura carbono-carbono no C_{60} leva a uma quebra de simetria (distorção de Jahn-Teller) muito importante para a supercondutividade nos fulerenos dopados com metais alcalinos[41, 49].

Apresentamos $|a(r)|^2 \times r/b$ para vários valores de U/t . Primeiro, estudemos o efeito da distância entre os dois elétrons com U/t fixo. Se $U/t = 0$, não existe influência sobre a distância elétron-elétron, e $a(i, j) = 1/60$ para todo i e j . Se U/t é diferente de zero, observamos que os elétrons preferem posicionar-se a distâncias maiores possíveis entre si.

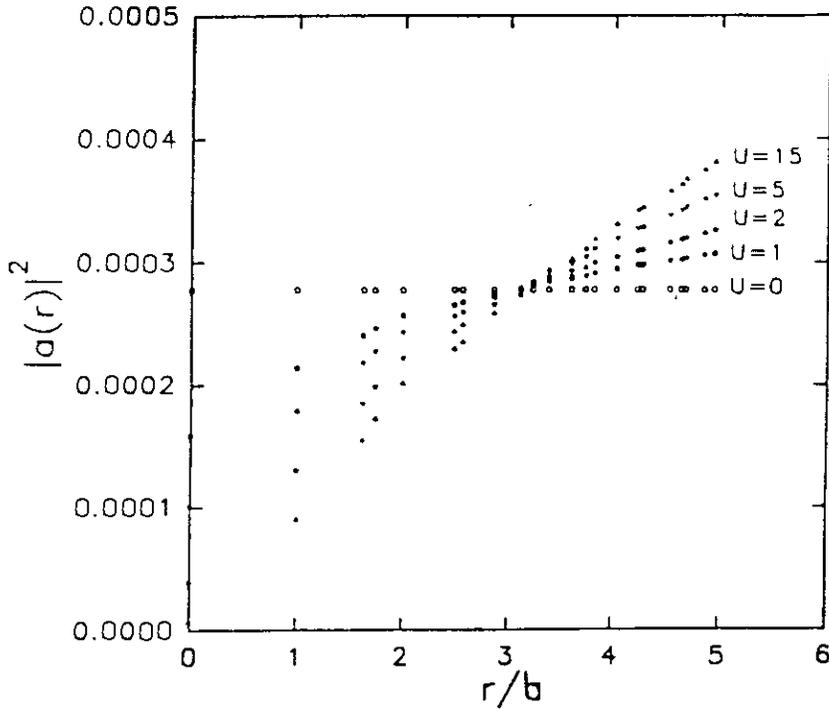


Figura 1.5: Probabilidade do estado onde os elétrons estão posicionados nos sítios i e j ($|a(r)|^2$) como função da distância linear r (em unidades do comprimento de ligação entre sítios vizinhos) entre i e j .

Assim, mesmo existindo apenas uma interação *intra-sítios*, as correlações levam a uma interação efetiva *inter-sítios*. Essa é uma interação repulsiva.

Agora, analisemos os efeitos de U/t com a distância entre dois elétrons fixos. Podemos ver que quando a distância entre os dois elétrons (r) é zero (isto é, os elétrons estão num mesmo sítio) ou pequena, se aumentamos U/t a probabilidade de encontrar os elétrons nesta distância decresce. Mas se a distância r é grande, quando aumentamos U/t a probabilidade dos elétrons estarem a uma distância r também aumenta. Assim, quando U/t aumenta os elétrons preferem ficar mais distantes um do outro. Observamos que existe uma distância r^* onde a influência de U/t sobre os elétrons torna-se indiferente, isto é, se aumentamos U/t a probabilidade dos elétrons estarem a uma distância r^* não modifica. Obtivemos que $r^*/b = 3.12143$. Na Fig. 1.1 representamos, através de círculos

pretos, duas posições (das possíveis) separadas por uma distância r^* .

1.3.2 O Problema de Nagaoka

Estudaremos a seguir o problema da estabilidade ferromagnética para o regime de forte correlação eletrônica onde adicionamos um buraco na banda semi-cheia. Este caso é conhecido como problema de Nagaoka. Consideraremos a estrutura da molécula de fulereno com 60 átomos. Podemos ver facilmente que o C_{60} não é uma rede bipartida, e sim uma estrutura frustrada antiferromagneticamente. Assim sendo, seguindo a Classificação de Nagaoka, o C_{60} pertence a classe B das estruturas.

O caso do estado de Nagaoka, onde $U = \infty$ e $S_Z = (N - 1)/2$ ($N = 60$ é o número de sítios do fulereno), pode ser facilmente resolvido, usando o fato de $U = \infty$, pela seguinte transformação: $c_{i\alpha}^\dagger \rightarrow c_{i\alpha}$, $c_{i\alpha} \rightarrow c_{i\alpha}^\dagger$. Para $U = \infty$, a soma do número de buracos mais o número de elétrons é igual a N . Portanto, o caso de um buraco adicionado a banda semi-cheia é mapeado no caso de apenas um elétron na banda, trocando o sinal de t . O caso de um elétron é trivial e já foi resolvido por vários autores[42].

Nós resolvemos numericamente, pelo método de diagonalização direta, o espectro do Hamiltoniano da Eq. 1.1 para a molécula de fulereno com 59 elétrons, $S_Z = (N - 3)/2$ e $U = \infty$ [9]. Diagonalizamos uma matriz de ordem 3540×3540 . Usando algumas simetrias de grupo da estrutura da molécula, reduzimos a dimensionalidade da matriz por um fator aproximadamente quatro. Os espectros para $S_Z = (N - 1)/2$ e $S_Z = (N - 3)/2$ são mostrados na Fig. 1.6. Na tabela 1.1, apresentamos os valores para a energia do estado fundamental. Vemos que o estado de Nagaoka é instável quando $t > 0$. E entretanto,

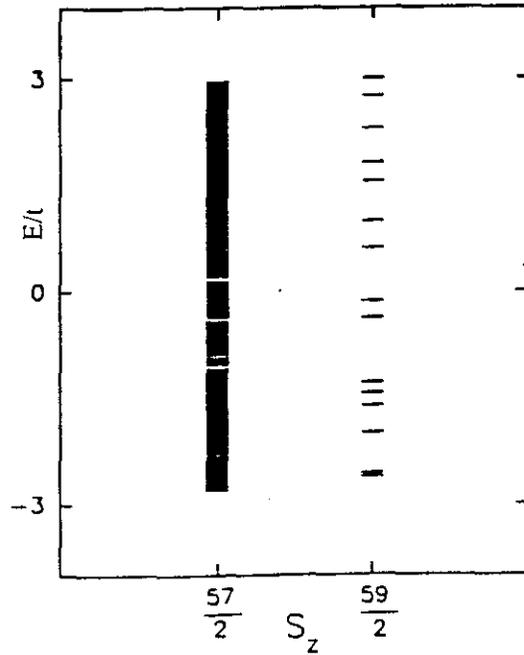


Figura 1.6: Espectro da molécula de fulereno no limite de forte correlação do modelo de Hubbard com um buraco na banda semi-cheia (3540 níveis de energia para $S_z = \frac{57}{2}$ e 60 níveis para $S_z = \frac{59}{2}$).

quando $t < 0$, o estado de Nagaoka é estável em relação ao caso $S_z = (N-3)/2$. Contudo, não computamos as energias para os estados fundamentais com valores de spin menores, pois a ordem da matriz torna-se muito grande impossibilitando sua diagonalização. Mas, se seguirmos a classificação de estruturas cristalinas feita por Nagaoka e Takahashi, nossa conclusão deve ser consistente com a presença do fulereno no caso B. Esse fato indica que para $t < 0$ o estado de Nagaoka é realmente estável.

Agora, consideraremos um caso mais realista para as moléculas de C_{60} . Como o comprimento das ligações simples são maiores que os das ligações duplas, é provável que a energia de salto dos elétrons entre os sítios dependa de sua posição, assim, devemos

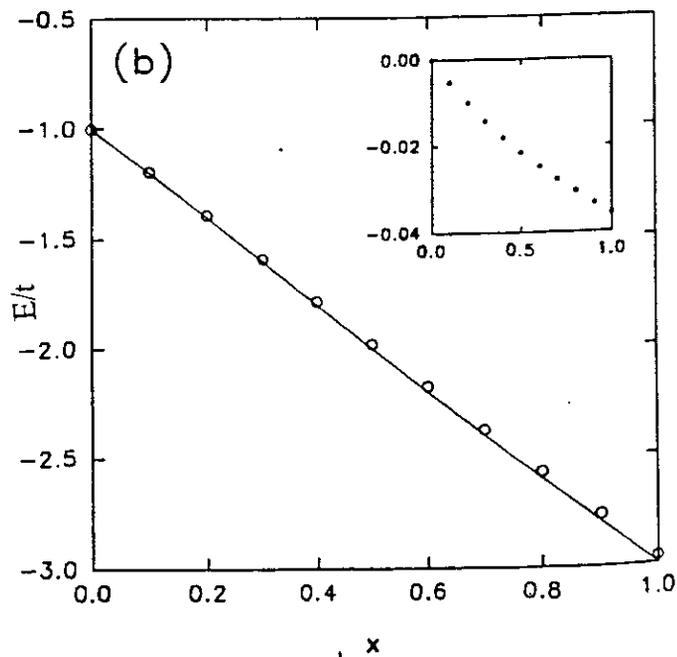
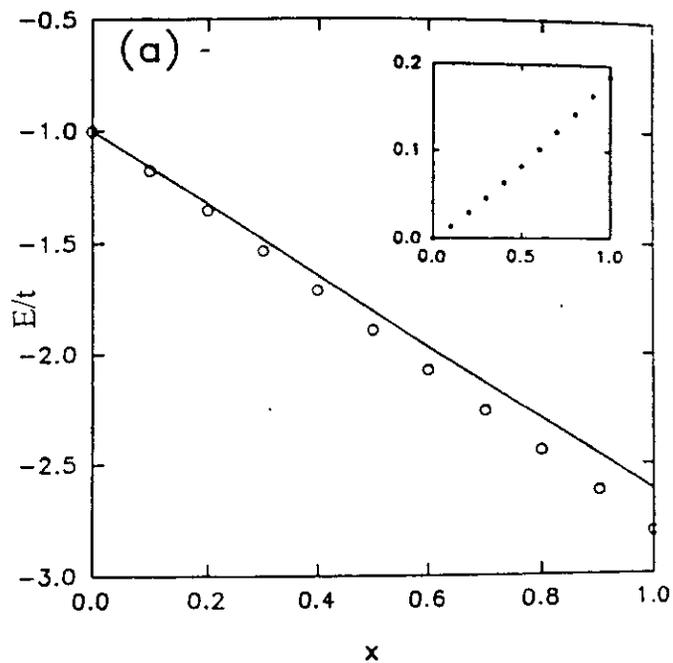


Figura 1.7: Estado fundamental para o fullereno com 59 elétrons versus $x = t_S/t_D$. Os círculos indicam $S_Z = \frac{57}{2}$ e a curva sólida indica $S_Z = \frac{59}{2}$. Figura interna: diferenças de energia dos estados fundamentais entre $S_Z = \frac{59}{2}$ e $S_Z = \frac{57}{2}$ como função de x . (a) $t_D=1$ e $t_S=x$; (b) $t_D=-1$ e $t_S=-x$.

escrever que[41, 42]:

$$t_{ij} = \begin{cases} -t_S & , \text{ ligações simples} \\ -t_D & , \text{ ligações duplas.} \end{cases} \quad (1.8)$$

Analisaremos separadamente as situações em que $t_D, t_S > 0$ e $t_D, t_S < 0$, e estudaremos seus efeitos.

Na Fig. 1.7 podemos ver o estado fundamental para $S_Z = (N - 1)/2$ (estado de Nagaoka) e $S_Z = (N - 3)/2$ como função de $x = t_S/t_D$. Assumimos que $t_D = 1$ e $t_S = x$ em (a); e $t_D = -1$ e $t_S = -x$ em (b). O limite $x = 1$ representa a situação $t_{ij} = -t_D = -t_S = -t$ já estudada nos parágrafos acima. As energias dos estados fundamentais foram mostradas na Tabela 1.1. No limite $x = 0$, os elétrons se propagam apenas entre sítios conectados por ligações duplas. Nesta situação temos 30 dímeros isolados, onde 29 estão completos com 2 elétrons e apenas um dímero tem um elétron que fica oscilando entre os dois sítios. Facilmente mostra-se que os autovalores deste problema são ± 1 para todos os valores de S_Z .

Considerações anteriores indicam que o C_{60} está caracterizado pela região próxima de $x = 1$ [41, 42]. Entretanto, o estudo do limite de x próximo de zero pode ser útil na avaliação de outros compostos, como, por exemplo, o tetracyanoquinodimetano (TCNQ), que forma cadeias dimerizadas[50].

Relembrando que o estado de Nagaoka é idêntico ao caso de somente um elétron, com o sinal de t_S e t_D trocados, e usando os resultados de Samuel [42] para um elétron,

| t=1 | | t=-1 | |
|----------------|-----------------|----------------|-----------------|
| S_Z | Energia | S_Z | Energia |
| $\frac{57}{2}$ | <u>-2.80519</u> | $\frac{57}{2}$ | -2.96430 |
| $\frac{59}{2}$ | -2.61803 | $\frac{59}{2}$ | <u>-3.00000</u> |

Tabela 1.1: Estado fundamental do modelo de Hubbard para o fulereno com 59 elétrons, $S_Z = \frac{57}{2}$ e $S_Z = \frac{59}{2}$. As energias são dadas em unidades de energia de salto dos elétrons (t).

encontramos:

$$E_0\left(\frac{59}{2}\right) = \begin{cases} -1 - 2x & ; t_D = -1, t_S = -x \\ -1 - 1.61803x & ; t_D = 1, t_S = x \end{cases} \quad (1.9)$$

onde $E_0\left(\frac{59}{2}\right)$ é o estado fundamental para $S_Z = 59/2$. No caso de $S_Z = 57/2$ não temos expressões analíticas para o estado fundamental, mas valores numéricos. Na Fig. 1.7 os círculos indicam a simulação numérica para $S_Z = 57/2$. As curvas sólidas representam a Eq. 1.9 para $S_Z = 59/2$.

Diferentes energias de saltos entre as ligações simples e duplas não criam nenhum novo comportamento, mas reduzem suavemente a estabilidade do estado de Nagaoka, ou, instabilidade, dependendo do sinal do termo de salto.

1.4 Conclusões

Sumariando nossos resultados, vimos que:

A) No problema de dois elétrons na molécula de C_{60} , i) o espectro de energia apresenta

duas bandas se $U > U^* = 5.11t$; ii) a diferença de energia entre as bandas aumenta linearmente com U/t ; iii) o estado fundamental é singlete se a integral de salto é negativa, e tripleto se positiva; iv) analisando o estado fundamental encontramos que se U/t é diferente de zero, os elétrons preferem a maior distância entre eles. A interação eletrônica repulsiva intra-sítios leva a uma interação efetiva repulsiva inter-sítios.

B) No problema de estabilidade do estado de Nagaoka, i) o ferromagnetismo deve ser esperado para a molécula de fulereno com um buraco na banda meio-cheia no caso de t_{ij} ter sinal positivo, ou com um elétron a mais na banda semi-cheia no caso de t_{ij} ter sinal negativo; ii) a molécula de fulereno está incluída na classe de estruturas frustradas antiferromagneticamente e suas propriedades devem ser qualitativamente diferentes das propriedades da rede quadrada[43]; iii) os resultados com $t_S \neq t_D$ são similares aos de $t_S = t_D$.

Isso sugere a tendência de encontrarmos ferromagnetismo em fulerenos dopados. Evidências experimentais não confirmam este ferromagnetismo para o C_{60} dopado com elétrons, contudo, ferromagnetismo tem sido encontrado quando o C_{60} é dopado com um agente orgânico redutor[51]. Portanto, o limite de $U = \infty$, deve ser uma boa aproximação para o C_{60} apenas se considerarmos a possibilidade da correlação eletrônica produzir uma forte interação efetiva elétron-elétron (U). Assim, o limite $U = \infty$ não é uma boa aproximação para o caso da simples dopagem eletrônica do fulereno (C_{60}^-). Mas, mostra-se um bom limite no caso da banda semi-cheia[45], e possivelmente, no caso de forte correlação eletrônica que apresente uma interação efetiva elétron-elétron (U) muito grande. Dentro deste contexto, indicamos a dopagem eletrônica do C_{60} através de algum agente redutor

| Energia de salto | Banda ferromagnética | Banda não-ferromagnética |
|------------------|----------------------|--------------------------|
| Positiva | Abaixo da semi-cheia | Acima e na semi-cheia |
| Negativa | Acima da semi-cheia | Abaixo e na semi-cheia |

Tabela 1.2: Conjectura sobre o magnetismo do fulereno no limite de forte acoplamento eletrônico.

que apresente uma interação elétron-elétron efetiva muito grande dentro dos sítios do fulereno. Esta consideração poderá ser avaliada experimentalmente através da medida da interação elétron-elétron, por exemplo, no caso do agente orgânico redutor da ref. [51].

Desde que temos predito ferromagnetismo para duas partículas e para a banda semi-cheia com um buraco, isto para o caso de forte correlação eletrônica, podemos conjecturar que o ferromagnetismo permanece estável para todas as concentrações de dopantes acima da banda semi-cheia. Uma conjectura equivalente foi feita para a rede triangular, que como a molécula de C_{60} tem conectividade topologicamente frustrada[46]. O caso da banda semi-cheia é equivalente ao modelo antiferromagnético de Heisenberg, e neste caso o estado ferromagnético com spin total máximo nunca é o estado fundamental[45].

Na Tabela 1.2 apresentamos esquematicamente nossa conjectura sobre o comportamento magnético do fulereno como função do sinal da matriz de salto e da concentração de elétrons para o limite de forte acoplamento eletrônico ($U = \infty$).

Capítulo 2

Um Modelo para Sequências de Nucleotídeos

2.1 Introdução

Como a história evolucionária dos organismos é registrada no seu material genético[52], podemos, por exemplo, esclarecer nosso entendimento sobre os processos de evolução das espécies, através do estudo das características das duas principais classes de macromoléculas que fazem a organização dos sistemas biológicos: os ácidos nucleicos e as proteínas.

Recentemente, foi proposto um método para estudar os processos estocásticos das

sequências de nucleotídeos, que formam a unidade monomérica dos ácidos nucléicos, consistindo da associação de uma caminhada aleatória a uma dada sequência. Este método estuda as flutuações existentes nas sequências e obtém o grau de correlação entre os nucleotídeos. O método é chamado de “caminhada de DNA”[14] e caracteriza-se por estudar o comportamento de um expoente α que mede a existência de correlação em função das distâncias dos nucleotídeos na sequência.

Muitas sequências de genes têm sido mapeadas numa caminhada de DNA unidimensional [14, 53, 54]. Já foram encontrados vários casos de sequências de DNA com correlação de longo-alcance. Essas correlações também têm sido detetadas através de outras técnicas de análise, entre as quais podemos citar os trabalhos de Li e Kaneko[55], de Voss[56] e de Berthelsen e outros[57].

A existência de correlação de longo-alcance nas sequências de DNA tem gerado grandes controvérsias. Diferentes comportamentos estatísticos são encontrados para regiões codificantes e não-codificantes do DNA. Sequências codificantes são constituídas usualmente de regiões com poucos desvios na composição das bases. Sequências não-codificantes apresentam flutuações mais complexas. Alguns autores[58, 59, 60] não encontraram diferenças relevantes no expoente α entre regiões codificantes e não-codificantes. Alguns deles mostraram que um expoente bem-definido, que caracterizaria a região, nem sempre existe para uma dada sequência. Por outro lado, outros autores[14, 61], encontram correlação de longo-alcance em genes tipo ‘intron’ (não codificantes), mas não encontram em sequências de DNA complementar (cDNA) ou em genes tipo sem ‘intron’ (codificantes). Diferenças de resultados entre regiões codificantes e não codificantes têm sido confirmadas

em trabalhos recentes[62, 63, 64], mostrando que o grau de correlação deve ser um bom critério para identificar regiões codificantes.

Em todo caso, o processo de aparecimento de tais correlações é ainda um problema em aberto[58, 65].

Em 1989, Tavaré e Giddings[66] estimaram a ordem em sequências de DNA, tratando-as como cadeias de Markov. Definindo uma cadeia como sendo de ordem k quando um nucleotídeo, num dado sítio, é determinado pelos k -ésimos nucleotídeos prévios, eles encontraram que a maioria das sequências exibe ordem maior que zero, ou seja, dependência entre nucleotídeos. Do ponto de vista dos mecanismos moleculares, interações de heterodimerização mostram-se constituir fator dominante na estabilidade dos ácidos nucléicos[67]. Ainda, forças não covalentes, como as pontes de hidrogênio, hidrofóbicas, van der Waals e eletrostáticas, são responsáveis pela estabilidade conformacional de toda cadeia molecular, particularmente dos ácidos nucléicos[68]. Estas forças por si mesmas dão, ao menos localmente, uma estrutura tridimensional tanto para o RNA, como também para o DNA[69].

Baseados nestas características, apresentamos um modelo para gerar sequências de nucleotídeos artificiais, que nos possibilita encontrar explicações quanto aos processos que criaram correlação entre os genes. O modelo consiste basicamente de uma cadeia de Markov discreta e finita, onde são introduzidas interações entre nucleotídeos vizinhos e entre alguns dos nucleotídeos distantes uns dos outros.

2.2 Os Ácidos Nucléicos

Os ácidos nucleicos são o elemento central de armazenamento e transferência da informação genética das espécies. Eles foram isolados pela primeira vez por Miescher, em 1870, de células do pus.

Através da hidrólise total da molécula de ácido nucleico, observou-se que sua estrutura é composta de: ácido fosfórico, açúcar do tipo pentose e compostos nitrogenados de caráter básico (base nitrogenada). As pentoses podem ser riboses ou desoxirriboses.

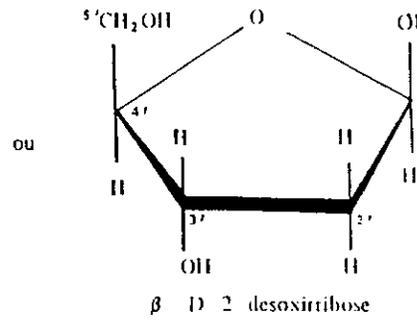
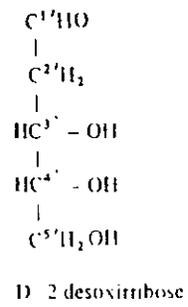
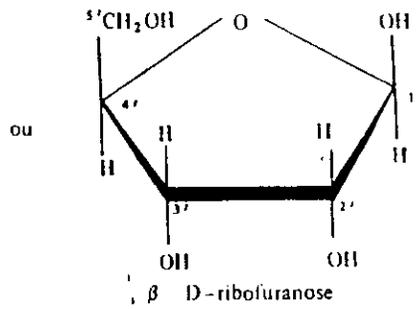
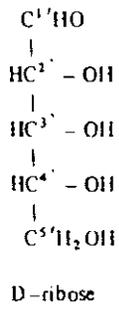
As bases nitrogenadas podem ser do tipo pirimídica, que são citosina, timina ou uracila, derivadas da pirimidina ou do tipo púrica, que são adenina e guanina, derivadas da purina. É interessante ressaltar que, embora essas sejam as principais bases nitrogenadas que aparecem nos ácidos nucleicos, outras podem ser encontradas, porém com menor frequência.

Na Fig. 2.1 apresentamos as estruturas moleculares das pentoses e das diferentes bases nitrogenadas.

Chamamos de nucleosídeos os compostos onde a base nitrogenada está ligada ao açúcar, através de uma ligação entre o C^{1'} da pentose e o N¹ da base pirimídica ou o N⁹ da base púrica.

Os *nucleotídeos* são nucleosídeos onde um grupo fosfato se combina com um dos carbonos da pentose que apresente um OH livre. A estrutura de um nucleotídeo pode ser representada por: Base-Açúcar-Fosfato. Os cinco principais nucleotídeos são: ácido timidílico, ácido citidílico, ácido uridílico, ácido adenílico e ácido guanílico. Esta nomenclatura é

(a)



(b)

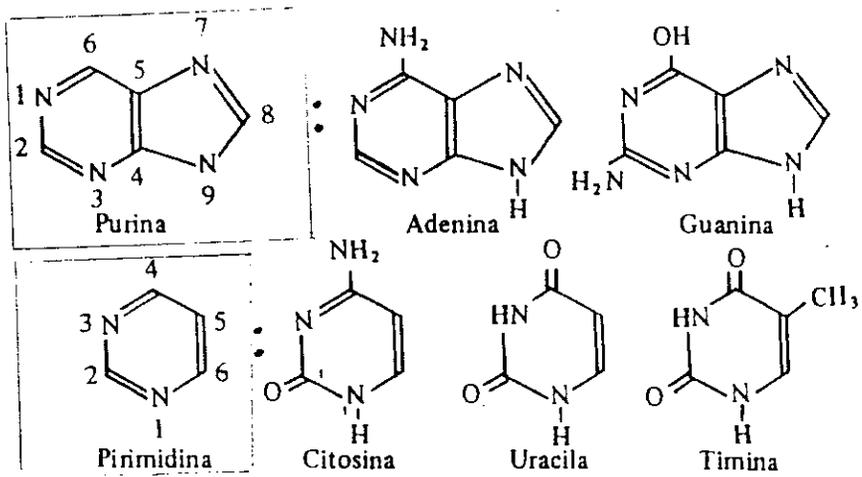


Figura 2.1: Estrutura molecular das (a) pentoses (b) bases nitrogenadas.

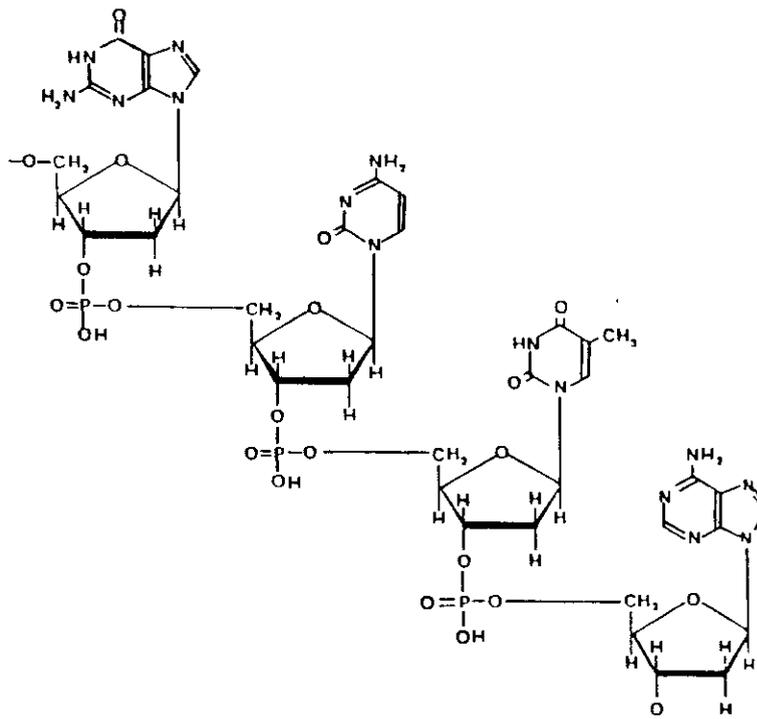


Figura 2.2: Estrutura de um tetra desoxirribonucleotídeo.

dada em função da base nitrogenada.

Os nucleotídeos são as unidades de repetição nos ácidos nucleicos. Assim, o fosfato é usado para esterificar o grupo OH de um nucleotídeo com o OH do nucleotídeo seguinte. Na Fig. 2.2 mostramos a estrutura de um tetra desoxirribonucleotídeo.

Têm-se, de acordo com o tipo de açúcar presente na molécula do ácido nucleico, o desoxirribonucléico (DNA) e o ribonucléico (RNA). As principais características do DNA e RNA são:

| Espécie | A | T | C | G | A/T | C/G | Pirimidina/Purina |
|-----------------|------|------|------|------|------|------|-------------------|
| Homem | 30.4 | 30.1 | 19.9 | 19.6 | 1.01 | 1.02 | 1.00 |
| Boi | 29.0 | 28.7 | 21.1 | 21.2 | 1.01 | 1.00 | 0.99 |
| Rato | 28.6 | 28.4 | 20.4 | 21.4 | 1.01 | 0.95 | 0.98 |
| Salmão(esperma) | 29.7 | 29.1 | 20.4 | 20.8 | 1.02 | 0.98 | 0.98 |
| E. coli | 24.7 | 23.6 | 25.7 | 26.0 | 1.05 | 0.99 | 0.97 |

Tabela 2.1: Composição em bases de DNA de diferentes espécies (%).

| | DNA | RNA |
|-------------|-------------------|--------------------|
| Açúcar: | D-2-desoxirribose | D-ribose |
| Ácido: | ácido fosfórico | ácido fosfórico |
| Purina: | adenina e guanina | adenina e guanina |
| Pirimidina: | citocina e timina | citocina e uracila |

Chamamos de estrutura primária dos ácidos nucleicos a sequência de nucleotídeos da molécula. Como a molécula é uma alternância de açúcar-fosfato e as bases nitrogenadas estão ligadas a esse açúcar, a estrutura primária pode ser considerada como sendo apenas uma sequência de bases nitrogenadas.

Na tabela 2.1 podemos observar um estudo feito por Chargaff, em 1950, sobre a composição, em bases nitrogenadas do DNA, de diferentes espécies.

Paralelo aos estudos feitos por Chargaff, Frankline e Wilkins estudavam o DNA através da difração de raios-x e concluíram que a molécula de DNA tinha o aspecto de um bastão de 20 Å de diâmetro, com unidades repetitivas a cada 3.4 e 34 Å. Baseados nestes estudos, em 1953, Watson e Crick propuseram uma estrutura para a molécula de DNA com as seguintes características: (i) formada de duas cadeias de polidesoxirribonucleotídeos, enroladas uma ao redor da outra, na forma de uma hélice dupla; (ii) as duas cadeias

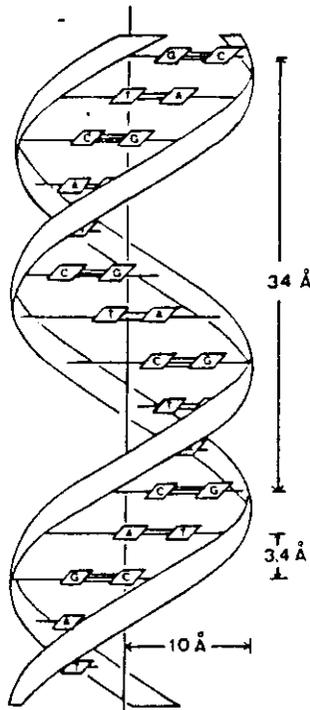


Figura 2.3: Estrutura da molécula de DNA.

são mantidas juntas através de pontes de hidrogênio entre a adenina de uma cadeia e a timina de outra, e entre a citosina e a guanina; (iii) na hélice dupla o par de bases deve permanecer no mesmo plano, perpendicular ao seu eixo; (iv) as duas cadeias são antiparalelas e complementares. Se em uma delas a sequência é, por exemplo, A-T-C-G-C-A, na outra será T-A-G-C-G-T. Um esquema da estrutura da molécula de DNA, segundo a hipótese de Watson e Crick pode ser visto na Fig. 2.3.

Em termos da sua distribuição nas células, o DNA, em sua maior parte, encontra-se no núcleo, associado às proteínas. Os RNA podem ser divididos em três tipos principais: o mensageiro (mRNA), o ribossômico (rRNA) e o de transferência (tRNA). O mRNA constitui a ponte de ligação entre a sequência de nucleotídeos e a sequência de aminoácidos. O rRNA está associado a proteínas, formando os ribossomos, e representa a maior parte do RNA celular (60 a 80 %). O tRNA serve para transportar determinados aminoácidos

para uma posição correta no ribossomo.

Finalmente, para um melhor entendimento das características e regiões dos DNA e RNA, citadas neste capítulo, apresentamos as suas funções básicas, que são fornecer a informação estrutural e reguladora para a síntese de proteínas específicas e servir como modelo para sua própria duplicação.

Dependendo das suas características, as moléculas desempenham funções específicas dentro das células. Assim, é necessário que a formação destas moléculas ocorra sempre sem erros e da mesma maneira. Este processo é chamado de biossíntese, que envolve três etapas: uma energética, na qual a molécula recebe energia para que seja ativada e possa sofrer a reação química; uma de crescimento da cadeia, no caso da formação de moléculas maiores; e outra de montagem propriamente dita. A biossíntese de proteínas pode ser representada esquematicamente como: $\text{DNA} \rightarrow \text{RNA} \rightarrow \text{Proteína}$. Na primeira etapa a informação genética codificada em termos de DNA é transcrita em termos de RNA, e em seguida a informação é traduzida em termos de proteína. Na transcrição, a molécula do DNA se desenrola e forma a molécula do RNA mensageiro (mRNA), que é complementar à hélice copiada. Esse mRNA sai do núcleo e, no citoplasma, associa-se à subunidade de ribossomas, formando o poliribossoma. Nessa associação, as bases nitrogenadas do mRNA ficam livres. Cada conjunto de três dessas bases nitrogenadas livres recebe o nome de *códon*. Esses códons são reconhecidos pelos anticódons (bases complementares) existentes nos RNA de transferência (tRNA), os quais transportam os aminoácidos para a posição correta na formação da proteína. Para cada aminoácido, existe pelo menos um tRNA. A sequência de nucleotídeos que determina a de aminoácidos é conhecida

como *cístron* ou *gene*. Realizado o pareamento códon-anticódon, enzimas específicas promovem a ligação do aminoácido à molécula em formação e assim, sucessivamente, tem-se o crescimento da molécula protéica. A proteína formada estabiliza-se através de sucessivos enrolamentos da estrutura primária e, em seguida, é transferida para o local onde exercerá suas atividades.

Na função de duplicação a própria molécula de ácido nucléico apresenta sua codificação, com o fornecimento adequado de precursores, enzimas e energia. É sabido que a molécula envolvida na transmissão das características de cada espécie é o DNA. A molécula de DNA se desenrola e as novas moléculas formadas apresentam metade da hélice antiga e metade da nova. Os erros de duplicação que compreendem mudanças permanentes no sistema de codificação são chamados de *mutação*, e podem compreender inserção, deleção ou substituição de nucleotídeos ou alterações na sua sequência. Os agentes mutagênicos mais comuns são as radiações ionizantes e os raios ultravioleta.

2.3 O Modelo

Com base num protótipo para estudos de efeitos de memória introduzido por nós[11, 12], consideraremos uma cadeia linear finita em que cada sítio i ($i=0,1,\dots,L$) é ocupado por uma variável randômica binária $\{S_i\}$. Se $S_i = +1$ diremos que na posição i existe uma base do tipo pirimídica (citosina, timina ou uracila), enquanto que se $S_i = -1$ existe uma do tipo púrica (adenina e guanina).

Cada elemento S_i na cadeia é escolhido considerando um elemento prévio S_k , onde $k = i - 1$ com probabilidade q , e $k = i - j$ para $1 < j \leq i$, com probabilidade $1 - q$. Assim, q mede a correlação entre os primeiros vizinhos.

Interações entre sítios afastados em uma sequência deve ocorrer através da formação de laços entre pedaços da cadeia. A probabilidade de encontrar um laço de comprimento j num polímero linear longo é dada por

$$P(j) \sim j^{-\mu} \quad (2.1)$$

com $j \geq l_c$, onde μ é um número real positivo, e l_c um inteiro que representa o corte na menor distância possível para o aparecimento de um laço[53].

Uma vez escolhido o sítio de interação k , temos que:

$S_i = S_k$ com probabilidade p ,

$S_i = -S_k$ com probabilidade $1 - p$.

Por convenção, $S_0 = 1$. A construção da cadeia linear é feita através do processo descrito acima[13].

Para uma melhor análise do modelo, é conveniente considerar uma probabilidade p_i na qual S_i é igual a 1. Considerando que

$$p_i = p_k p + (1 - p_k)(1 - p) \quad (2.2)$$

onde k é igual a $i - 1$ ou $i - j$, como definido acima, é fácil encontrar que p_i obedece a

seguinte relação recursiva:

$$p_i = (2p - 1)[qp_{i-1} + (1 - q)p_{i-j}] + 1 - p \quad 1 \leq i \leq L, \quad (2.3)$$

com $p_0 = 1$.

A variável que representa o excesso de pirimidinas com relação às purinas, numa cadeia de tamanho l é:

$$Y(l) \equiv \sum_{i=1}^l S_i. \quad (2.4)$$

Seu valor médio $\langle Y(l) \rangle$, equivalente ao deslocamento médio após l passos da caminhada randômica, é:

$$\langle Y(l) \rangle = 2 \sum_{i=1}^l p_i - l. \quad (2.5)$$

A medida de correlação da sequência construída é obtida pela raiz quadrada da flutuação média quadrática[14]:

$$\langle F^2(l) \rangle \equiv \overline{[\Delta Y(l) - \overline{\Delta Y(l)}]^2} \quad (2.6)$$

onde $\Delta Y(l) \equiv Y(l + l_0) - Y(l_0)$, e as barras indicam médias computadas sobre todas as posições l_0 na sequência ($1 \leq l_0 \leq L - l$).

No caso particular $q = 1$ a solução exata da relação de recorrência (Eq. 2.3) é:

$$p_i = \frac{(2p - 1)^i + 1}{2}. \quad (2.7)$$

Da Eq. 2.6, usando a Eq. 2.7, calculamos $\langle F^2(l) \rangle$, onde é feita uma média sobre um

grande número de seqüências randômicas independentes. Após alguns cálculos diretos, encontramos para o caso particular $L = 2l$, usualmente analisado, que:

$$\langle F^2(l) \rangle = \frac{p}{3(1-p)} \left(l - \frac{1}{l} \right) + \frac{2p-1}{2(1-p)^2} \left\{ \frac{p}{l(1-p)} - 2(1-p_l) - \frac{(2p-1)(1-p_l)(2-p_l)}{l^2(1-p)^2} \right\} \quad (2.8)$$

Portanto, vemos facilmente de 2.8 que os comportamentos assintóticos para $1 \ll l \ll L$ são:

$$\sqrt{\langle F^2(l) \rangle} \sim \begin{cases} 0 & \text{se } p=1 \\ \left(\frac{pl}{1-p}\right)^{1/2} & \text{se } 0 < p < 1 \\ 0 & \text{se } p=0 \text{ (l par)} \\ 1 & \text{se } p=0 \text{ (l ímpar)} \end{cases} \quad (2.9)$$

Do comportamento assintótico, concluímos que não existe correlação de longo-alcance. Os casos $p = 0$ e $p = 1$ são não físicos, já que experimentalmente não há casos semelhantes. Analisando o expoente α da inclinação local de $\sqrt{\langle F^2(l) \rangle}$ versus l , encontramos que α começa com um valor próximo de p e decresce rapidamente para o valor $\alpha = 0.5$. Assim, no limite $q = 1$ o modelo não reproduz o comportamento de α observado experimentalmente para seqüências de nucleotídeos com correlação. Observemos que mesmo existindo um efeito de memória, produzido pela construção da cadeia com $p \neq 1/2$ (Eq. 2.7), obtivemos $\lim_{i \rightarrow \infty} p_i = 1/2$ para todo $0 < p < 1$. Então, para grandes distâncias o efeito de memória se anula.

Consideremos agora o caso mais geral, no qual $q \neq 1$. Comparamos as seqüências

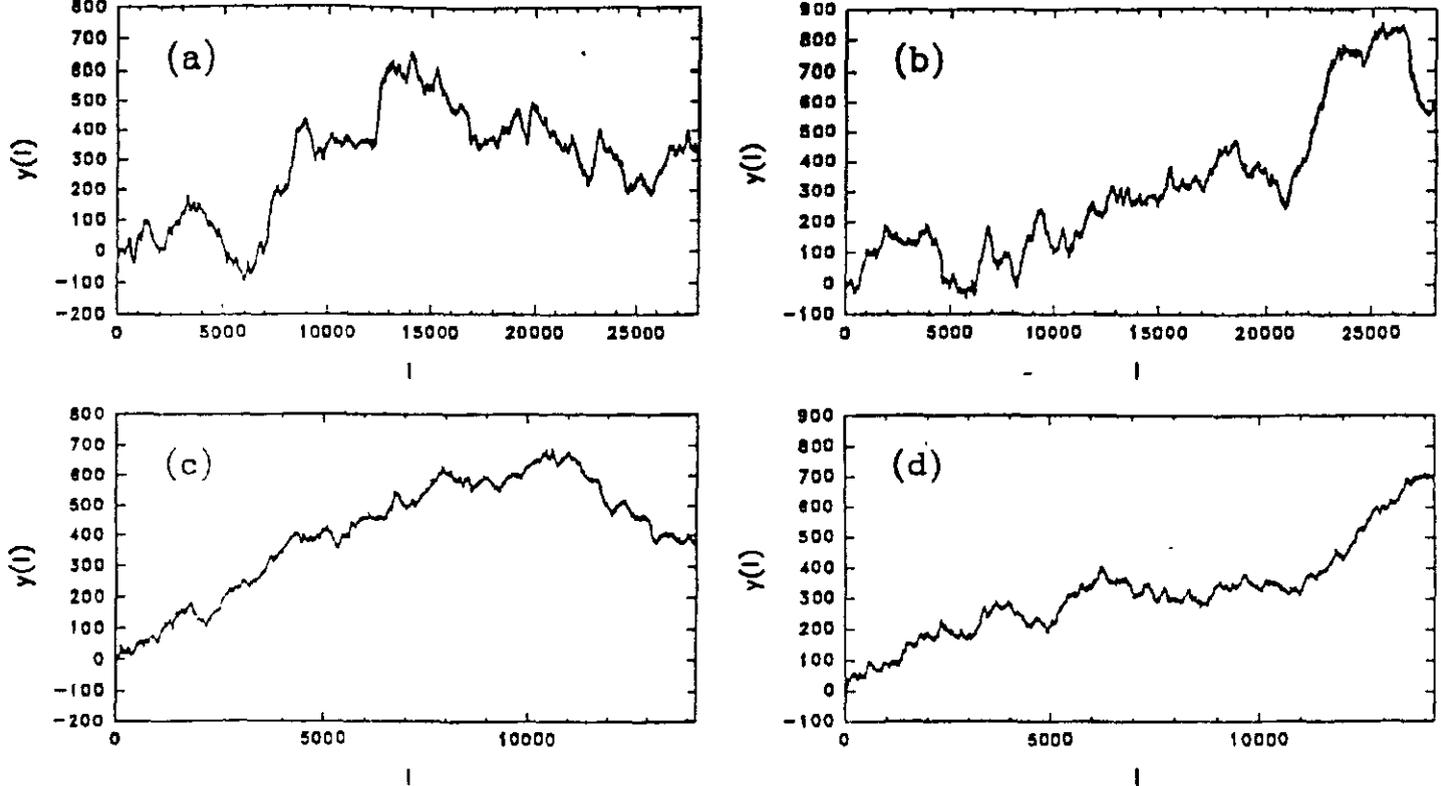


Figura 2.4: Deslocamento da caminhada de DNA ($Y(l) \equiv$ excesso de pirimidinas com relação a purinas) em função do comprimento da cadeia de nucleotídeos. (a) Cadeia da miosina β cardíaca humana (nome no GenBank: HUMBMYH7); (b) sequência artificial gerada com os parâmetros $p=0.85$, $q=0.25$, $\mu=1.65$ e $l_c=6$; (c) cadeia de gene humano (nome no GenBank: HSAT3) e; (d) sequência artificial gerada com os parâmetros $p=0.77$, $q=0.37$, $\mu=1.5$ e $l_c=4$.

geradas artificialmente pelo nosso modelo com sequências reais. Na Figura 2.4 (a) e (c), mostramos a “caminhada de DNA” de duas sequências reais: cadeia de genes da miosina β -cardíaca humana e de genes anti III humano, respectivamente. Na figura 2.4 (b) e (d), mostramos caminhadas típicas encontradas artificialmente para diferentes valores dos parâmetros do modelo (p , q , μ e l_c). As sequências artificiais foram geradas com o mesmo comprimento das reais para que pudéssemos compará-las. As curvas das Figs. 2.4 (a) e (b), e da Fig. 2.4 (c) e (d) mostram flutuações similares.

Os gráficos da inclinação local da função de flutuação versus o logaritmo da distância ao longo das sequências da Fig. 2.4 são apresentados na Fig. 2.5. As sequências da Fig. 2.4 (a) e (b) são analisadas na Fig. 2.5 (a), e da Fig. 2.4 (c) e (d) são analisadas na Fig. 2.5 (b). Podemos observar que existe uma grande similaridade entre os resultados obtidos

pelo nosso modelo e por sequências reais. É interessante notar que várias sequências reais, como as mostradas aqui, decrescem suavemente seus valores de inclinação até um tamanho aproximadamente igual a 5. Este valor corresponde no nosso modelo ao valor do parâmetro l_c .

2.4 Discussão

As interações presentes entre primeiros vizinhos não são suficientes para criar uma correlação de longo-alcance, como mostramos pela análise do caso $q = 1$. Por outro lado, quando foram introduzidas interações entre nucleotídeos mais distantes, apareceram correlações de longo-alcance e as sequências reais foram simuladas.

Testamos regras alternativas para gerar sequências artificiais. Além da interação com o vizinho anterior, fizemos também: (i) interação com a média de todos nucleotídeos precedentes; (ii) interação com um nucleotídeo a uma distância fixa. Para nenhum conjunto de parâmetros, dessas alternativas, fomos capazes de obter um $\alpha(l)$ com comportamento similar aos das sequências com correlação. Portanto, concluímos que a existência de uma largura na distribuição do tipo de interação nucleotídeo-nucleotídeo, é necessária para obtermos a correlação observada nas sequências reais.

Da análise do caso $q = 1$ notamos que o expoente α não é constante sobre todo o intervalo de valores de l , mas, isto não significa que ele não possa ter um valor característico, correspondendo ao comportamento assintótico de F . Este valor característico pode ser

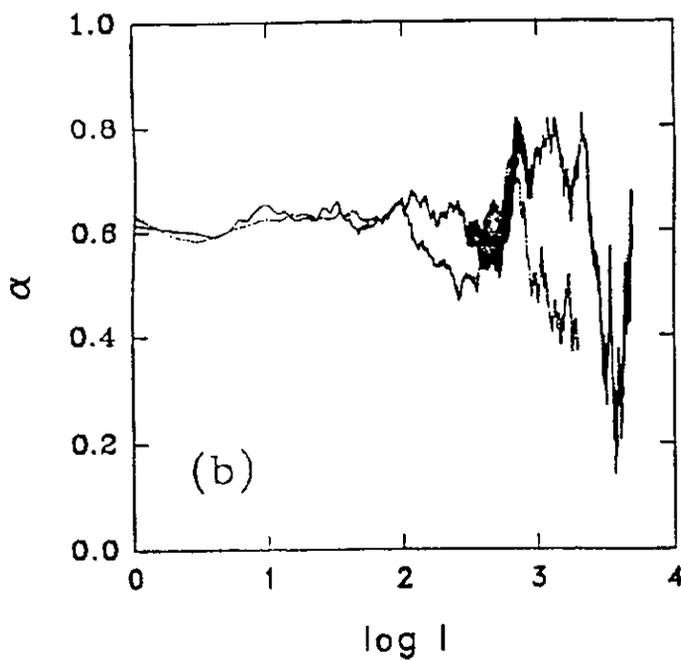
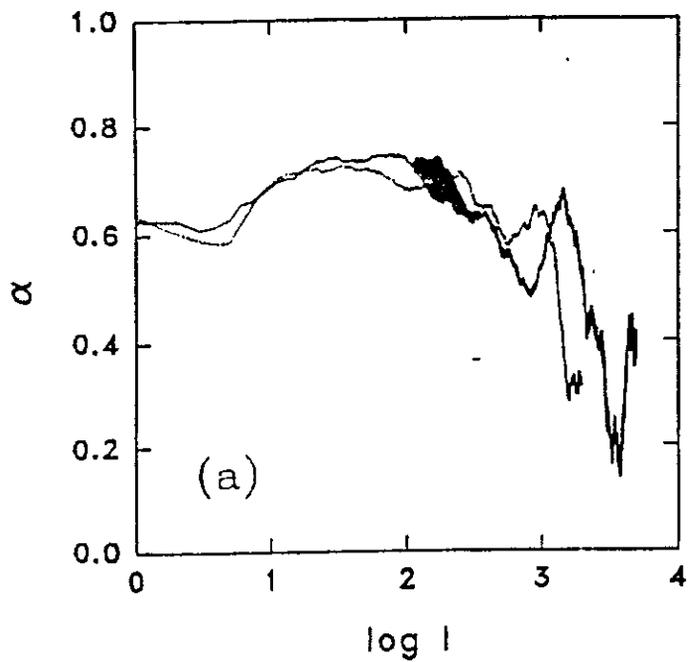


Figura 2.5: Inclinação local da função de flutuação versus o logaritmo da distância ao longo das seqüências da Figura anterior. (a) corresponde às seqüências a e b; (b) corresponde às seqüências c e d. Linhas cheias representam às seqüências reais e linhas pontilhadas às artificiais.

diferente dos valores locais de α . Por outro lado, expoentes diferentes de 0.5 a distâncias finitas, indicam algum tipo de correlação de longo-alcance, mas não necessariamente de infinito alcance, inclusive porque as sequências reais são finitas. O máximo que podemos observar são correlações da ordem do comprimento da cadeia analisada.

Em 1992, Nee[58] mostrou a possibilidade do surgimento aparente de correlações de longo-alcance (expoente diferente de 0.5) pela união de duas sub-cadeias sem correlação (geradas aleatoriamente, mas com densidades de nucleotídeos diferentes entre elas). Assim, a ocorrência de diferentes propriedades estatísticas podem apresentar expoentes maiores que 0.5 através da presença de subdomínios randômicos. O comportamento das sequências reais devem ser resultado da combinação de mecanismos de união de sub-cadeias com o mecanismo apresentado aqui. Entretanto, também existe a possibilidade da correlação de longo-alcance observada nas sequências reais seja função apenas da interação entre nucleotídeos distantes.

Mecanismos envolvendo a produção de novos materiais genéticos, tais como a recombinação, estão associados a formação de laços que favorecem a interação entre nucleotídeos distantes. O conjunto desses laços, em algum estágio da evolução das sequências de nucleotídeos, ou pela criação de uma nova sequência ou pela ligação com outra pré-existente, pode ter promovido a correlação de longo-alcance observada. Por outro lado, é conhecido que estruturas de laços são frequentemente mais encontradas em regiões não-codificantes do DNA, tal como nas regiões intergenéticas, como encontradas por Sanger e outros[69]. Como já apontado por Grosberg e outros[70], vê-se que a correlação entre arranjos espaciais e propriedades fractais podem explicar porque regiões codificantes e não-codificantes

são estatisticamente diferentes. Encontra-se altas correlações em regiões não-codificantes.

Nosso modelo é consistente com essas considerações. O trabalho aqui desenvolvido baseia-se num modelo muito simples que exhibe os mesmos tipos de efeito de sequências reais. Assim, podemos evidenciar um possível fator (o ingrediente básico do modelo: interação entre unidades distantes) responsável pela correlação observada. Esta evidência não seria fácil de se observar em modelos com mais ingredientes. Assim, a exploração do modelo aqui apresentado contribui para um melhor entendimento das propriedades estatísticas encontradas nas diferentes regiões dos ácidos nucléicos e apresenta mecanismos para explicá-las.

Capítulo 3

Um Modelo para o Mercado de Ações

Fenômenos que evoluem com dependência aperiódica, como os encontrados nos campos da economia e finanças, são de difícil entendimento. A própria explicação de como se chega a esta evolução temporal “complicada” gera, muitas vezes, problema, pois não fica claro por qual das maneiras se chega na dependência aperiódica. Do ponto de vista de sistemas econômicos, são bastantes incertos quais os parâmetros relevantes para isolá-los e resolvê-los.

Séries temporais de sistemas econômicos são muitas vezes citadas como exemplo de séries randômicas. Entretanto, será que são realmente randômicas? Será que o uso da palavra randômica se refere apenas à atual não possibilidade de predição empírica? Quais as causas da não predição? Será a ignorância por não conhecer as causas que geram o seu

comportamento?

É importante citar que em muitos exemplos clássicos de sistemas ditos randômicos, a descoberta de sua dinâmica transformou-os em problemas previsíveis através de leis físicas.

A causa de um comportamento randômico pode, além da ignorância, vir da mecânica quântica, da complexidade e do caos. Assim, as causas da natureza randômica nas variáveis econômicas podem ser a complexidade, que é a irreduzibilidade do número de graus de liberdade, e o caos.

Particularmente, no estudo da demanda-oferta, volume, preço e toda dinâmica que existe nas bolsas de valores, temos uma forte dependência de fatores externos, dificilmente controláveis, que dão uma natureza estatística ao problema. Os métodos usuais aplicados são de testar séries temporais de dados e verificar o padrão caótico através da dependência nas condições iniciais, dimensão fractal, etc [71, 72].

Entretanto, vários problemas são encontrados, como por exemplo, a dimensionalidade. Apenas em baixas dimensões é possível ter evidências de processos caóticos, mas, na teoria de bolsa de valores são necessárias grandes quantidades de variáveis. Além disso, o tamanho das amostras é pequeno para o uso dos testes matemáticos. Pela sua complexidade, as bolsas de valores podem ser analisadas por um sistema dinâmico, que deve ser não-linear e com grande número de graus de liberdade. Com base nesta consideração, bolsas de valores têm sido tratadas usando a teoria de sistemas complexos em termos de dinâmica não-linear[73].

Atualmente, a análise da evolução temporal dos preços das ações é feita frequentemente

usando a teoria fractal [74]. Existe uma corrente que tenta encontrar caos determinístico nestes processos. Em particular, L. Summers propôs tratar as flutuações no mercado de ações em termos de dinâmica não-linear. Para isto, ele introduziu o conceito de “noisy traders” e “sophisticated traders” e teve algum sucesso. Entretanto, seu modelo não foi considerado completamente convincente (página 248 of [73]).

Dentro da filosofia de aplicar dinâmica não-linear ao mercado de ações, propomos um modelo teórico, um protótipo para o mercado de ações, baseado num sistema de equações acopladas. Através de sua dinâmica analisamos o comportamento de várias quantidades do mercado para entender interessantes fenômenos que ocorrem nas bolsas de valores, tais como a influência do uso maciço dos computadores pelos corretores.

Aqui, vamos considerar que no mercado de ações os corretores tenham livre acesso às informações do mercado, operando em regime competitivo e com uma variedade de opiniões diferentes.

3.1 Modelos

3.1.1 Mercado de uma Empresa

Neste caso consideramos uma grande empresa e N corretores [15]. Suporemos que a empresa detém um número infinitamente grande de ações, o que significa que o volume de ações negociadas é sempre muito menor do que o total, como acontece com as estatais e os

grandes bancos. Esta suposição, na verdade uma restrição do nosso modelo, é feita para que a compra de ações por um corretor não implique na falta de novas ações e portanto na impossibilidade de outro corretor poder também comprar.

Associamos a cada corretor a seguinte lei de distribuição:

$$P_i^{(t)} = (1 - p_i^{(t)})\delta(X) + p_i^{(t)}\delta(X - 1) \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (3.1)$$

onde δ representa a função delta de Kroenecker. Consideramos que $X = 1$ se o corretor compra ações e $X = 0$ se o corretor não compra. $p_i^{(t)} \in [0, 1]$ representa a probabilidade de demanda no tempo t do i -ésimo corretor relativo a empresa em questão. É importante observar que estamos tratando com a demanda potencial e não com a probabilidade de realmente comprar ações. Além de não estarmos incluindo vendas de ações.

A equação fundamental que acopla a demanda potencial da empresa entre os corretores é a seguinte:

$$p_i^{(t+1)} = \alpha_i p_i^{(t)} + \frac{\beta_i}{N-1} \sum_{j \neq i} p_j^{(t)} - \frac{\gamma_i}{N-1} p_i^{(t)} \sum_{j \neq i} p_j^{(t)} \quad (3.2)$$

onde $\{\alpha_i, \beta_i, \gamma_i\}$ representa o conjunto de parâmetros externos, tomados aqui sempre positivos. Como $0 \leq p_i^{(t)} \leq 1$, segue diretamente que $\sum_{i=1}^N p_i^{(t)} \in [0, N]$. Admitimos um dia como unidade de tempo. Assim cada variação no tempo das variáveis significa ter passado um dia. A Eq. 3.2 representa a variação temporal da probabilidade de um corretor querer comprar ações em função de três termos “psicológicos” (parte direita da equação) que medem a tendência do corretor continuar fazendo o que ele havia feito no

momento anterior; a tendência de ele fazer o que os outros corretores fizeram no momento anterior; e a tendência do corretor ser mais “esperto” que seus competidores e mudar de opinião em relação aos outros. Os parâmetros que dão o peso a cada um dos três termos são:

1) α_i -parâmetro: Mede a persistência inercial do desejo do i -ésimo corretor. No caso particular de $p_i^{(t+1)} = \alpha_i p_i^{(t)}$, e portanto, $\beta_i = \gamma_i = 0$, temos: (i) $p_i^{(t)}$ decresce com o tempo se $0 < \alpha_i < 1$; $p_i^{(t)}$ permanece constante se $\alpha_i = 1$; (iii) $p_i^{(t)}$ aumenta com o tempo se $\alpha_i > 1$).

2) β_i -parâmetro: Mede a influência, em cada desejo individual de um dado corretor, do desejo médio de todos os outros corretores. Se $\alpha_i = \gamma_i = 0$ e $\beta_i = \beta$, o comportamento do valor médio $\langle p \rangle (t) \equiv (\sum_{i=1}^N p_i^{(t)})/N$, (i) decresce com o tempo se $0 < \beta < 1$; (ii) permanece constante se $\beta = 1$; (ii) cresce com o tempo se $\beta > 1$.

3) γ_i -parâmetro: Está associado com a tendência de um dado corretor mudar de opinião e não comprar ações quando os outros corretores desejam comprar. Na ausência desse fator, a vantagem pessoal seria modesta ou impossível. Todos os corretores chegariam a um valor de equilíbrio idêntico para a vontade de comprar ações, fato que não representa a situação real para o mercado. Uma interessante justificativa para este termo está na famosa anedota em que Joseph Kennedy (pai do presidente John Kennedy dos EUA) vendeu suas ações e escapou do colapso do mercado de ações em 1929 porque seu engraxate comentou que tinha comprado ações.

Veremos na seção 3.2 deste capítulo que a quantidade $\langle p \rangle (t)$ pode ser relacionada com o preço das ações. Consequentemente, o valor de $\langle p \rangle (t)$ reflete o preço das ações.

Sua dinâmica é dada fazendo a soma sob todos os corretores na Eq. 3.2.

Podemos observar que se $\{\alpha_i, \beta_i, \gamma_i\}$ são escolhidos arbitrariamente, a equação 3.2 não garante automaticamente que $0 \leq p_i^{(t)} \leq 1$ para todos valores de i e t , violando assim a definição de probabilidade. Essa dificuldade pode, em princípio, ser superada através de vários processos. Por exemplo, introduzir convenientemente a função tangente hiperbólica que transforma o intervalo $(0, \infty)$ no intervalo $(0, 1)$). Por simplicidade adotamos a seguinte prescrição: quando $p_i^{(t)}$ estiver acima de 1 ele é trocado por $p_i^{(t)} = 1$ e quando estiver abaixo de zero por $p_i^{(t)} = 0$.

Neste ponto, iremos analisar algumas propriedades da equação 3.2. Os pontos fixos encontrados são os seguintes: (i) $p_i^{(t)} = 0$ para todos valores de i . (ii) No limite $N \rightarrow \infty$, para $p_i = \beta_i p_{av} / (1 - \alpha_i + \gamma_i p_{av})$ ($\forall i$), onde a média $p_{av} \equiv \langle p \rangle$ (∞) satisfaz $\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \beta_i / (1 - \alpha_i + \gamma_i p_{av}) = 1$ (em particular, $(\alpha_i, \beta_i, \gamma_i) \equiv (\alpha, \beta, \gamma)$ implica $p_i = p_{av} = (\alpha + \beta - 1) / \gamma, \forall i$).

Uma propriedade interessante da equação foi observada no caso particular $\alpha_i \equiv \alpha$, $\beta_i \equiv \beta$ e $\gamma_i \equiv \gamma$. Se aplicarmos $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N$ em ambos os membros da Eq. 3.2 encontramos

$$[\langle p \rangle (t+1)] = (\alpha + \beta) [\langle p \rangle (t)] - \gamma \frac{N}{N-1} [\langle p \rangle (t)]^2 + \gamma \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^N [p_i^{(t)}]^2 \quad (3.3)$$

assim, no limite $N \rightarrow \infty$,

$$[\langle p \rangle (t+1)] = (\alpha + \beta) [\langle p \rangle (t)] - \gamma [\langle p \rangle (t)]^2. \quad (3.4)$$

Introduzindo agora a variável $Z(t) \equiv (\gamma \langle p \rangle (t)) / (\alpha + \beta)$, Eq. 3.4 torna-se

$$Z(t+1) = (\alpha + \beta)Z(t)(1 - Z(t)) \quad (3.5)$$

que é a conhecida *equação logística* (ver [75] e referências contidas). Duas propriedades importantes contidas na Eq. 3.5 são: (i) se $\alpha + \beta \leq 4$, $Z(t)$ automaticamente permanece dentro do intervalo $[0,1]$ caso isso ocorra em $t = 0$, portanto, o mesmo acontece com $\langle p \rangle (t)$ se $\alpha + \beta \leq \gamma$ (assim, $\langle p \rangle (t) \in [0, (\alpha + \beta)/\gamma]$). Consequentemente a situação realística corresponde a $\alpha + \beta$ igual, ou suavemente abaixo de γ : (ii) se $\alpha + \beta \in (3.57, 4)$ o sistema pode ser *caótico*.

Estudaremos agora o caso mais geral para os valores de $\{\alpha_i, \beta_i, \gamma_i\}$ que em princípio podem ser diferentes para cada corretor. Assumiremos que o conjunto $\{\alpha_i\}$ obedece à lei de distribuição $D_\alpha(\alpha_i)$, para cada um dos corretores; analogamente, $\{\beta_i\}$ e $\{\gamma_i\}$ obedecem, respectivamente, as distribuições $D_\beta(\beta_i)$ e $D_\gamma(\gamma_i)$. Essas distribuições são caracterizadas basicamente por seus valores médios $\bar{\alpha}$, $\bar{\beta}$ e $\bar{\gamma}$, bem como suas larguras W_α , W_β e W_γ .

Para caracterizar mais uma situação real no mercado de bolsas de valores podemos interpretar as larguras das distribuições dos parâmetros $\{\alpha_i\}$, $\{\beta_i\}$ e $\{\gamma_i\}$ como um fator de divergência de opiniões entre os corretores. Ainda sob nossa interpretação, observamos que o uso de computadores, cada vez mais frequente na análise do mercado de ações, corresponde a situação tipicamente de pequenos valores para as larguras (W_α , W_β , W_γ). Isso se deve a observação de que os softwares usados são similares e os corretores seguindo suas recomendações têm poucas divergências de opinião quanto a comprar ou não comprar

ações.

Com base nesta análise definimos dois tipos de corretores: os chamados de *corretores informatas*, com pequenos valores para as larguras, e os chamados de *corretores humanos* com valores largos para as larguras.

Um dos efeitos mais importantes que queremos analisar dentro do presente modelo é que o risco de colapso no mercado de ações decresce monotonamente com o crescimento de W_α , W_β e W_γ .

Iremos discutir basicamente dois modelos diferentes. O primeiro deles, o qual faremos referência como temperado, consiste em fixar um conjunto de valores para as variáveis $\{\alpha_i, \beta_i, \gamma_i\}$ ($(D_\alpha, D_\beta, D_\gamma)$ em $t = 0$), isto é, cada corretor irá evoluir, em todo tempo t , sob os mesmos valores de (α, β, γ) , entretanto estes valores podem diferir de corretor para corretor. O segundo modelo, que chamaremos de recozido, consiste na escolha randômica, a cada novo passo de tempo, de $\{\alpha_i, \beta_i, \gamma_i\}$ ($(D_\alpha, D_\beta, D_\gamma)$). A intuição sugere que o modelo recozido leve a resultados mais aleatórios que o modelo temperado. Nossos resultados confirmaram essa intuição, e o modelo temperado com larguras ($W_\alpha, W_\beta, W_\gamma$) comportou-se similarmente ao modelo recozido com larguras menores. Conseqüentemente, é suficiente discutir em detalhes apenas um dos modelos. Escolhemos o modelo recozido.

Outro mecanismo que aumenta a aleatoriedade (note que a Eq. 3.2 para o modelo temperado é estritamente determinista) é a presença de um termo que adiciona um ruído-branco $\eta_i^{(t)}$ no segundo membro da Eq. 3.2. Em nossas simulações não foi observada nenhuma influência drástica desse termo.

Iremos agora discutir nossos resultados numéricos para a evolução temporal do valor

médio ($\langle p \rangle (t)$) e do desvio médio da demanda potencial. O desvio médio da demanda potencial é dado pela seguinte equação:

$$\sigma^N(t) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [p_i^{(t)} - \langle p \rangle (t)]^2} . \quad (3.6)$$

Ainda, podemos definir

$$\sigma^T = \sqrt{\frac{1}{T} \sum_{t=1}^T [\langle p \rangle (t) - \bar{p}]^2} \quad (3.7)$$

onde \bar{p} é o valor médio de $\langle p \rangle (t)$ para largos valores de intervalo de tempo T (usamos como valor típico $T = 100$).

Estas quantidades dependem das condições iniciais $\{p_i^{(0)}\}$. Temos usado uma grande variedade delas, variando a forma da distribuição dos valores de $\{p_i^{(0)}\}$. Em todos os casos (genéricos), após um curto transiente, o sistema “esquece” a distribuição inicial de $\{p_i^{(0)}\}$. Então, por conveniência, escolhemos para trabalhar com $\{p_i^{(0)}\}$ considerando uma distribuição de ruído-branco no intervalo $[0,1]$. Claramente, $\langle p \rangle (t)$ e $\sigma(t)$ também deveriam depender de N . Variamos N no intervalo $[30,3000]$ e nenhuma influência significativa foi encontrada para qualquer valor específico de N . Portanto, escolhemos, consistentemente, trabalhar com $N=300$ (razoável com relação à ordem de magnitude do número de corretores em bolsas de valores).

Também verificamos que a forma particular das distribuições de $\{D_\alpha(\alpha_i), D_\beta(\beta_i), D_\gamma(\gamma_i)\}$ não é muito importante, sua influência é bem caracterizada através dos seus valores médios $(\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma})$ e suas larguras. Consequentemente, por conveniência, escolhemos trabalhar com $(\alpha_i, \beta_i, \gamma_i)$ seguindo a distribuição de ruído-branco nos intervalos $\bar{\alpha} - \frac{W_\alpha}{2} \leq$

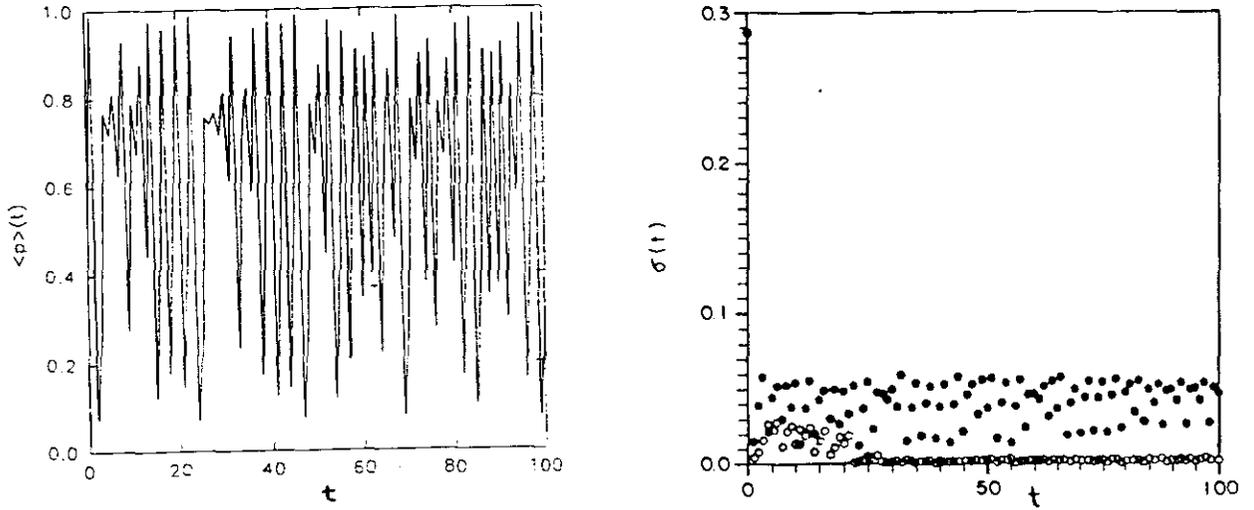


Figura 3.1: Evolução temporal da média da probabilidade da demanda potencial. Modelo recozido sem ruído e $N = 300$, para $\bar{\alpha} = \bar{\beta} = \bar{\gamma}/2 = 1.85$ e $W_\alpha = W_\beta = W_\gamma/2 \equiv W$: (a) $\langle p \rangle(t)$ para $W = 0.2$; (b) $\sigma(t)$ para $W = 0.2$ (círculos cheios) e $W = 0$ (círculos vazios).

$\alpha_i \leq \bar{\alpha} + \frac{W_\alpha}{2}$, $\bar{\beta} - \frac{W_\beta}{2} \leq \beta_i \leq \bar{\beta} + \frac{W_\beta}{2}$, $\bar{\gamma} - \frac{W_\gamma}{2} \leq \gamma_i \leq \bar{\gamma} + \frac{W_\gamma}{2}$, respectivamente. Para ilustrar a situação mais interessante (i.e., caos) escolhemos trabalhar principalmente com $\bar{\alpha} = \bar{\beta} = \bar{\gamma}/2 \in [1.78, 2]$ e $W_\alpha = W_\beta = W_\gamma/2 \in [0, 0.2]$. Finalmente, desde que os efeitos que queremos enfatizar são mais claros para o modelo recozido sem ruído, nos restringiremos a estudar este caso. Na Fig. 3.1(a) mostramos um gráfico típico da dependência temporal de $\langle p \rangle(t)$ (correspondendo a $\bar{\alpha} = \bar{\beta} = \bar{\gamma}/2 = 1.85$); embora $W_\alpha = W_\beta = W_\gamma/2 = 0.2$ tenha sido usado, a situação é praticamente a mesma para, digamos, $W_\alpha = W_\beta = W_\gamma/2 = 0$. Na Fig. 3.1(b) apresentamos, para as duas situações citadas, a evolução temporal de $\sigma^N(t)$; podemos ver claramente a influência das larguras ($W_\alpha, W_\beta, W_\gamma$).

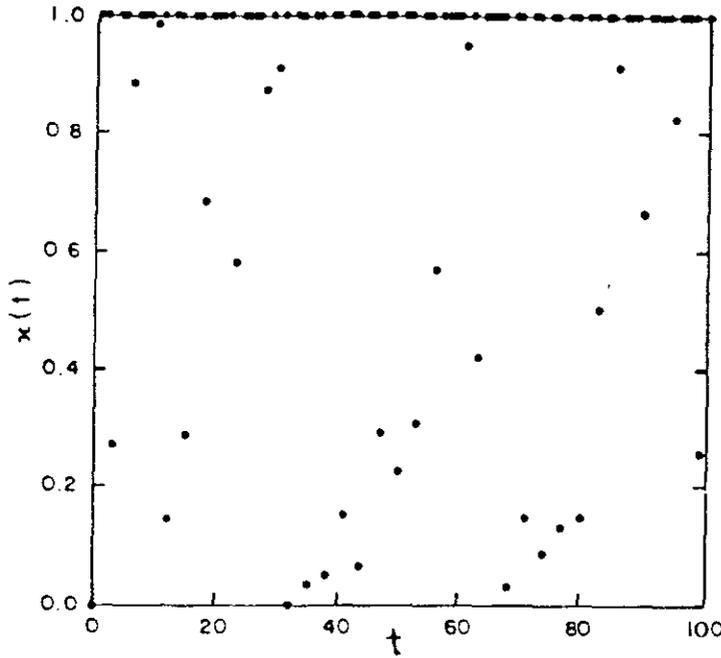


Figura 3.2: Evolução temporal do índice de colapso das bolsas de valores $\kappa(t)$. Modelo recozido sem ruído e $N = 300$, para $\bar{\alpha} = \bar{\beta} = \bar{\gamma}/2 = 1.9$ e $W_\alpha = W_\beta = W_\gamma/2 = 0.1$

Agora, é conveniente introduzir o *índice de colapso de bolsas de valores*. Este índice mede a possibilidade dos preços das ações despencarem a valores muito baixos, se considerarmos que isto acontece sempre que grande parte dos corretores têm a mesma vontade de querer ou de não querer comprar ações ao mesmo tempo. Definiremos o índice de colapso da bolsa de valores $\kappa(t)$ como:

$$\kappa(t) = \left(\frac{N_\uparrow^{(t)} - N_\downarrow^{(t)}}{N} \right)^2. \quad (3.8)$$

$\kappa(t)$ é um número entre zero e um e aumenta se os corretores têm a mesma vontade, de comprar ou de não comprar. $N_\uparrow^{(t)}$ é o número de corretores que têm $p_i^{(t)} > 1/2$, enquanto $N_\downarrow^{(t)}$ é o número de corretores que têm $p_i^{(t)} < 1/2$. Mostramos na Fig. 3.2 a evolução temporal $\kappa(t)$ (correspondendo a $\bar{\alpha} = \bar{\beta} = \bar{\gamma}/2 = 1.9$ e $W_\alpha = W_\beta = W_\gamma/2 = 0.1$).

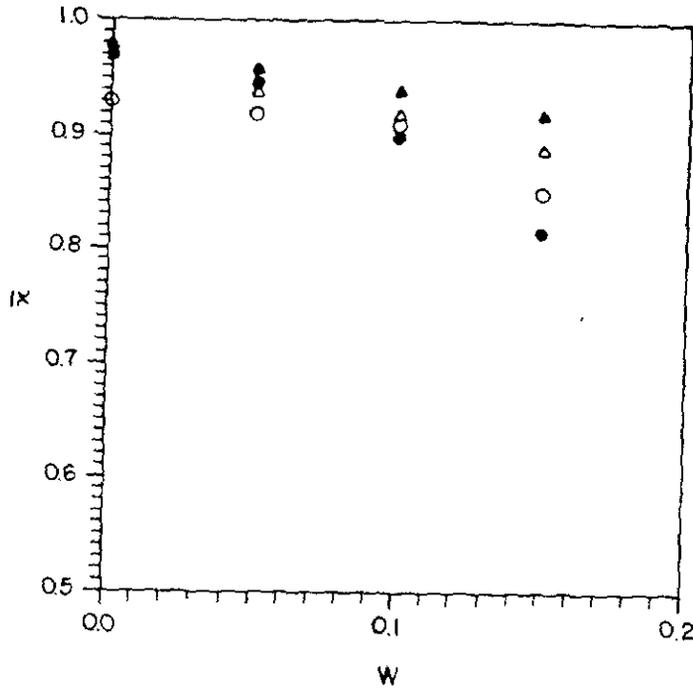


Figura 3.3: Valor médio do índice de colapso da bolsa de valores $\bar{\kappa}$ como função da largura $W_\alpha = W_\beta = W_\gamma/2 \equiv W$. $N = 300$ e $\bar{\alpha} = \bar{\beta} = \bar{\gamma}/2 = 1.85$. Representamos \bullet para recozido sem ruído; \circ para recozido com ruído ($|\eta_i^{(t)}| \leq 0.1$); \blacktriangle temperado sem ruído; \triangle temperado com ruído ($|\eta_i^{(t)}| \leq 0.1$).

O valor médio temporal do índice de colapso das bolsas de valores $\bar{\kappa}$ é dado por

$$\bar{\kappa} \equiv \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T \kappa(t). \quad (3.9)$$

Nós escolhemos $T = 100$ como valor típico. Apresentamos, na Fig. 3.3, $\bar{\kappa}$ como função de $W_\alpha = W_\beta = W_\gamma/2 \equiv W$ para casos típicos de $\bar{\alpha} = \bar{\beta} = \bar{\gamma}/2$. Simulamos os quatro casos de estudo, temperado ou recozido, com ou sem ruído. É claro ver que o risco de colapso do mercado de ações é menor para corretores humanos (largo W) que para corretores informatas (pequeno W).

3.1.2 Mercado com M Empresas

Consideraremos o caso de mais de uma empresa, mais precisamente, M grandes empresas e N corretores[76]. Associamos a cada corretor a seguinte função distribuição

$$P_i^{(t)} = (1 - \sum_{l=1}^M p_{il}^{(t)})\delta(X) + \sum_{l=1}^M p_{il}^{(t)}\delta(X - l) \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (3.10)$$

onde $X = 0$ se os corretores não compram ações e $X = l$ se os corretores desejam comprar ações da l -ésima empresa ($l = 1, 2, \dots, M$). $p_{il}^{(t)} \in [0, 1]$ representa a probabilidade de demanda, no tempo t , do i -ésimo corretor com relação a l -ésima empresa.

A generalização da equação fundamental que acopla a demanda potencial é:

$$\begin{aligned} p_{il}^{(t+1)} = & \alpha_{il} p_{il}^{(t)} \prod_{k \neq l} (1 - p_{ik}^{(t)}) + \frac{\beta_{il}}{N-1} \sum_{j \neq i} \{p_{jl}^{(t)} \prod_{k \neq l} (1 - p_{jk}^{(t)})\} \\ & - \frac{\gamma_{il}}{N-1} p_{il}^{(t)} \left\{ \prod_{k \neq l} (1 - p_{ik}^{(t)}) \right\} \sum_{j \neq i} \{p_{jl}^{(t)} \prod_{k' \neq l} (1 - p_{ik'}^{(t)})\} \\ & + \delta_l \frac{N}{\sum_i p_{il}^{(t)}} \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (l = 1, 2, \dots, M) \end{aligned} \quad (3.11)$$

Todos os parâmetros também foram generalizados e agora têm dependência da l -ésima empresa.

Também, introduzimos o parâmetro δ_l . Este parâmetro foi interpretado como o peso da intervenção externa usada para proteger algumas empresa em dificuldade, uma vez

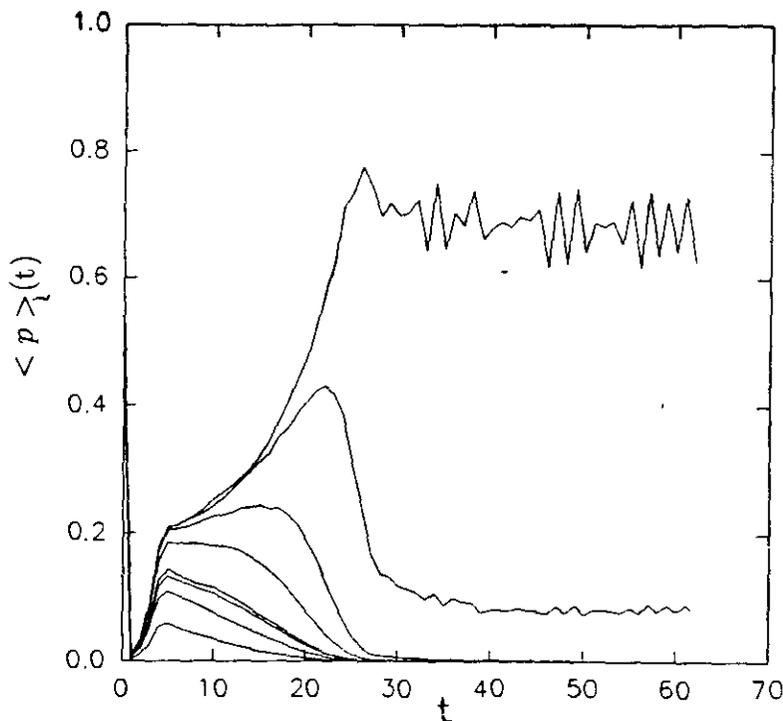


Figura 3.4: Valor médio da demanda potencial para 8 empresas em função da variação temporal. Modelo recozido sem ruído e $N = 100$, para $\bar{\alpha}_i = \bar{\beta}_i = 1.5$, $\bar{\gamma}_i = 3.5$, $\delta_i = 0$ e $W_\alpha = W_\beta = W_\gamma/2 = 0.2$.

que não depende do i -ésimo corretor, sendo clara sua importância na sequência.

O valor médio da demanda potencial depende agora da empresa. Temos $\langle p \rangle_i(t) \equiv (\sum_{i=1}^N p_{il}^{(t)})/N$. Na Fig. 3.4 apresentamos um diagrama típico da evolução temporal de $\langle p \rangle_i(t)$. Nesse exemplo, temos 8 (oito) empresas e podemos ver que uma empresa tem uma demanda potencial muito maior que as outras. Isso é sempre possível quando $\delta_i = 0$ para todas as empresas. Nós concluímos que é muito importante a intervenção para o equilíbrio do mercado e indica que o tipo de capitalismo primitivo, sem controle do Estado, por exemplo, irá levar a um mercado de monopólios. A importância do policiamento externo no mercado de ações já foi constatada em outros modelos[77].

Agora, se δ_i é diferente de zero (um caso típico é mostrado na Fig. 3.5) nossos resultados numéricos indicam que as companhias têm demandas potenciais equivalentes (existência de um mercado competitivo).

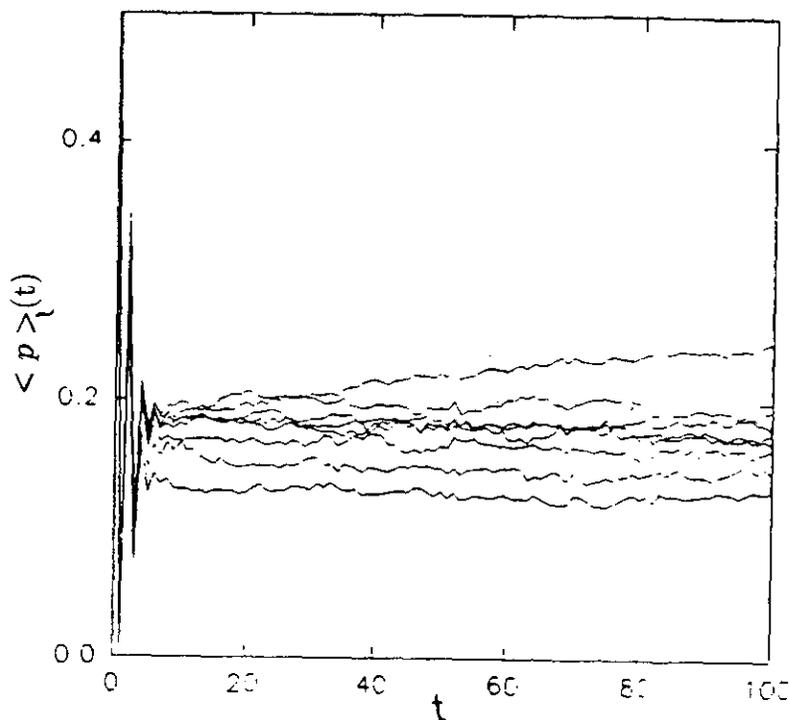


Figura 3.5: Valor médio da demanda potencial para 8 empresas em função da variação temporal. Modelo temperado sem ruído e $N = 100$, para $\bar{\alpha}_l = \bar{\beta}_l = 1.0 - 0.1 l$ e $\bar{\gamma}_l = 3.2$. $\bar{\delta}_1 = 0.007$, $\bar{\delta}_l = 0.008$ para $l = 2, 3, 4, 5, 6, 7$, $\bar{\delta}_8 = 0.001$ e $W_\alpha = W_\beta = W_\gamma/2 = 0.02$.

O índice de colapso da bolsa de valores $\kappa(t)$ é generalizado para:

$$\kappa(t) = \frac{1}{M} \sum_{l=1}^M \kappa_l(t) \langle p \rangle_l(t) \quad (3.12)$$

e

$$\kappa_l(t) = \log \left(\frac{\sigma_l^T}{\sigma_l^N(t)} \right) \quad (3.13)$$

onde $\sigma_l^N(t)$ e σ_l^T são dependentes da l -ésima empresa. Este novo parâmetro difere bastante do definido no modelo de apenas uma empresa. Entretanto, como antes, $\kappa(t)$ é um número que aumenta se os corretores têm a mesma vontade. Na Fig. 3.6 apresentamos a evolução temporal do índice de colapso da bolsa de valores para 1 e 8 empresas. Podemos ver que no caso do modelo de uma empresa, representado por círculos, o risco de colapso é maior que o caso onde temos muitas empresas, representado por triângulos.

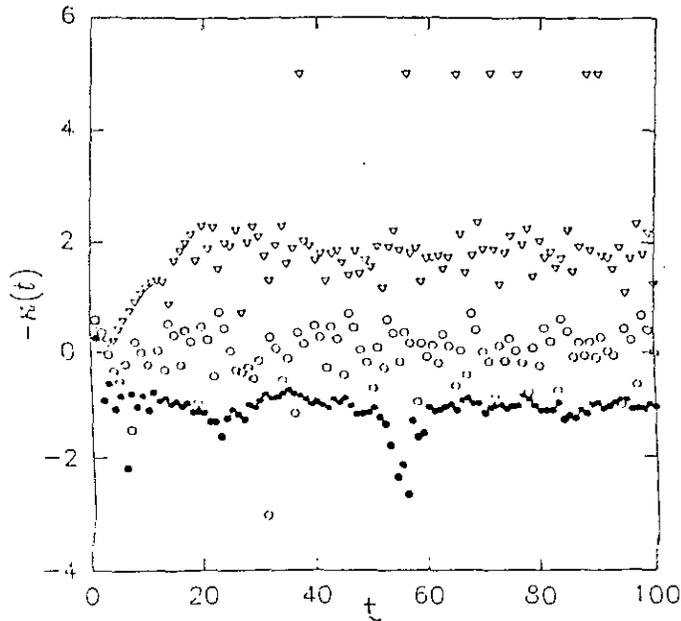


Figura 3.6: Índice de colapso para os modelos de 1 e 8 empresas em função da variação temporal, representados por círculos e triângulos, respectivamente. Os parâmetros para o modelo de 1 empresa são iguais aos da Figura 3.1(a) (círculos cheios) e 3.1(b) (círculos vazios), e para o modelo de 8 empresas são iguais aos da Figura 3.5 (triângulos vazios).

3.2 Conexão Probabilidade-Preço

Até agora temos descrito a dinâmica da probabilidade de demanda, mas o preço, a variável mais importante para a economia, não foi analisado. Portanto, a seguir, introduziremos as implicações do nosso modelo aos preços.

Definimos a probabilidade de operação p_O como sendo dada por:

$$p_O = p_{BC} \cdot p_B \cdot p_{SC} \cdot p_S \tag{3.14}$$

onde p_{BC} , p_B , p_{SC} e p_S são respectivamente a probabilidade de: comprador poder comprar, comprador querer comprar, vendedor poder vender e vendedor querer vender. Esta definição é bastante intuitiva pois considera que a probabilidade de se realizar uma operação comercial é o produto das probabilidades que envolvem as vontades e possibilidades

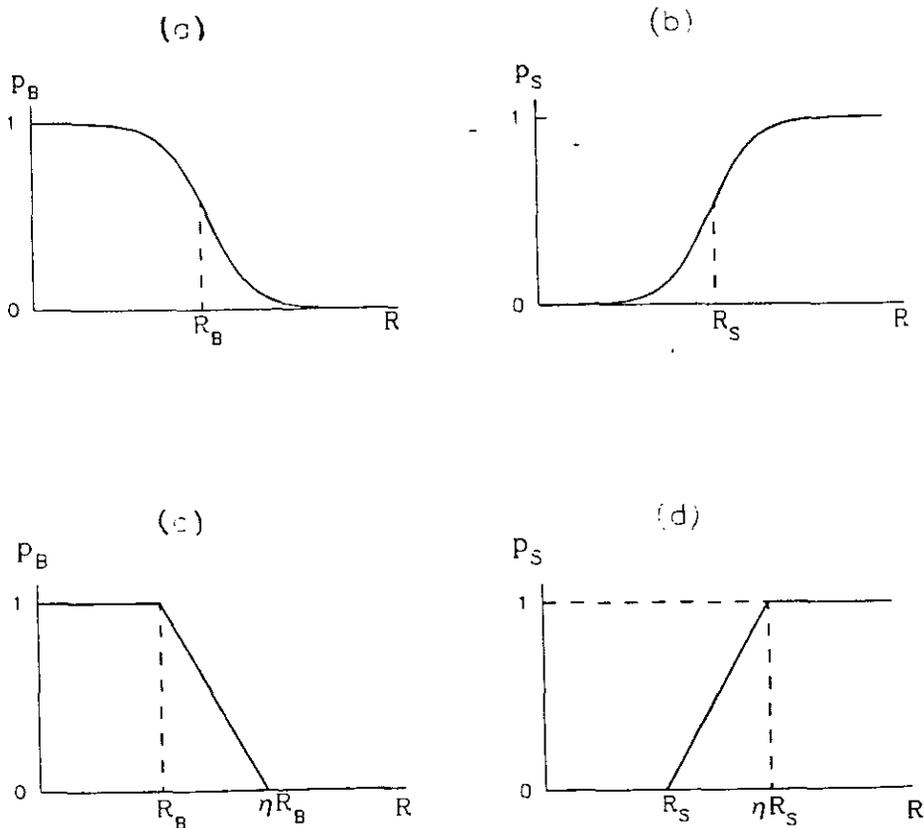


Figura 3.7: Esquema da relação entre preço e as probabilidades de: (a) comprador querer comprar, (b) vendedor querer vender, (c) aproximação usada para p_B , (d) aproximação usada para p_S .

do comprador e do vendedor do produto em questão. Na Fig. 3.7(a) e 3.7(b) apresentamos qualitativamente a relação entre as probabilidades p_B e p_S e o preço R . A evidência experimental dessas relações podem ser encontrados na ref. [76].

Faremos uma aproximação teórica para as probabilidades a fim de podermos aplicá-las quantitativamente a um problema particular, que tenha poder de aplicabilidade. Consideramos $p_{BC} = p_{SC} = 1$ e para p_B e p_S suporemos que:

$$p_B = \begin{cases} 1 & , \text{ se } R < R_B \\ \frac{\eta - R/R_B}{\eta - 1} & , \text{ se } R_B < R < \eta R_B \\ 0 & , \text{ se } R > \eta R_B \end{cases} \quad (3.15)$$

$$p_S = \begin{cases} 0 & , \text{ se } R < R_S \\ \frac{R/R_S - 1}{\eta - 1} & , \text{ se } R_S < R < \eta R_S \\ 1 & , \text{ se } R > \eta R_S. \end{cases} \quad (3.16)$$

Essas representações são mostradas na Fig. 3.7(c) e 3.7(d). É possível separar quatro casos de estudo,

i: $0 < R_B < \eta R_B < R_S < \eta R_S$

ii: $0 < R_S < \eta R_S < R_B < \eta R_B$

iii: $0 < R_B < R_S < \eta R_B < \eta R_S$

iv: $0 < R_S < R_B < \eta R_S < \eta R_B.$

De 3.14 obtemos que $p_O = 0$ ($\forall R$) para o caso i. Os outros casos, mais complexos, estão representados na Fig. 3.8.

Com relação à distribuição de preços, apresentamos na Fig. 3.9(a) seu comportamento qualitativo. Como exemplo numérico, consideramos a seguinte aproximação para a distribuição de preços:

$$P(R) = \begin{cases} 0 & , \text{ se } R < R_S \\ 1/(\eta R_B - R_S) & , \text{ se } R_S < R < \eta R_B \\ 0 & , \text{ se } R > \eta R_B. \end{cases} \quad (3.17)$$

Esta escolha é feita de forma a representar de maneira qualitativa o comportamento

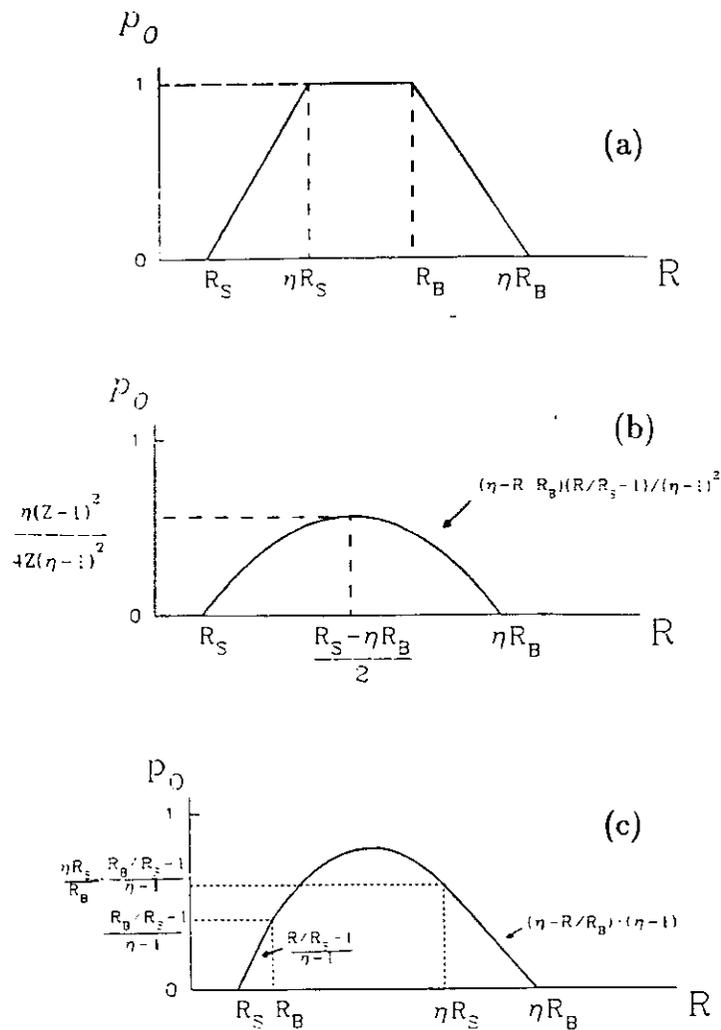


Figura 3.8: Esquema da relação entre preço e a probabilidade de operação de compra e venda. (a) caso ii, (b) caso iii, (c) caso iv.

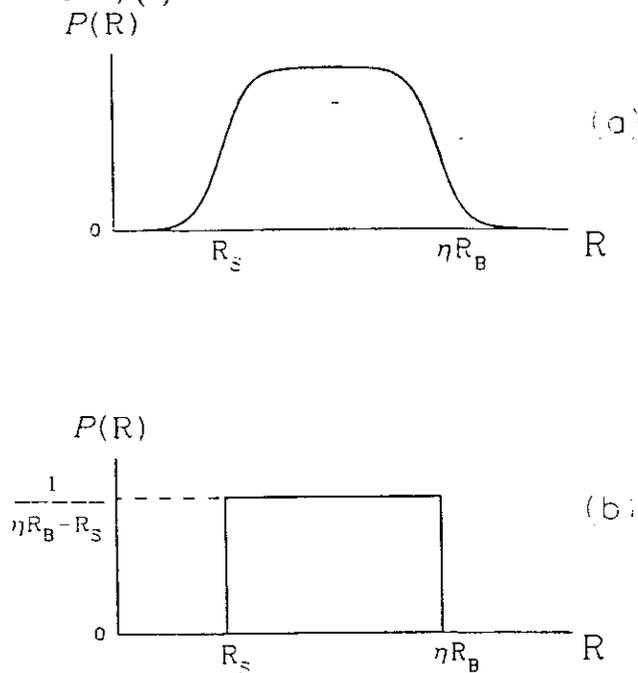


Figura 3.9: Distribuição de preços de um produto. (a) esquema qualitativo, (b) aproximação deste trabalho (Eq. 3.17).

real para a distribuição e possibilitar o estudo analítico de suas propriedades. Segue diretamente que o preço médio é:

$$\langle R \rangle = \frac{\int P(R)RdR}{\int P(R)dR} = R_S \frac{(1+Z)}{2} \quad (3.18)$$

onde $Z = \eta R_B / R_S$. Definindo a média da probabilidade de operação como:

$$\langle p_O \rangle = \frac{\int p_O(R)P(R)dR}{\int P(R)dR}, \quad (3.19)$$

temos, após alguns cálculos diretos para cada um dos casos estudados, que

$$(i) \langle p_O \rangle = 0$$

$$(ii) \langle p_O \rangle = \frac{(1+\eta)(Z-\eta)}{2\eta(Z-1)}$$

$$(iii) \langle p_O \rangle = \frac{\eta}{6Z} \left(\frac{Z-1}{\eta-1} \right)^2$$

$$(iv) \langle p_O \rangle = \frac{1}{Z-1} \left\{ \frac{(Z-\eta)^2(z+\eta^3)}{2Z\eta^2(\eta-1)} + \frac{\eta(\eta^2-Z)[2(Z+1)(\eta^2+z)-6Z\eta^2]+2(Z^3-\eta^6)}{6Z\eta^3(\eta-1)^2} \right\}.$$

Para concluir, apresentamos a relação preço médio \times média da probabilidade de operação na Fig. 3.10. Em particular, podemos ver que o equilíbrio demanda-oferta tem maior possibilidade de ocorrer na região entre $\eta - 1$ e $\eta^2 - 1$, que corresponde ao caso

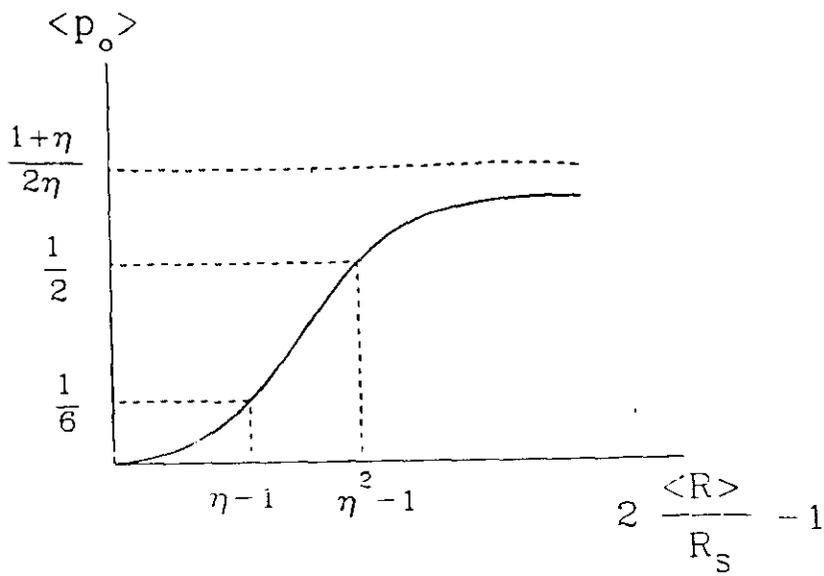


Figura 3.10: Esquema da relação entre preço médio e a média da probabilidade de operação.

(iii) em estudo. Portanto, escolhendo esta região como a região responsável pela operação compra e venda, temos

$$\langle p_o \rangle = \frac{2\eta}{3(\eta - 1)^2} \frac{(\frac{\langle R \rangle}{R_S} - 1)^2}{2\frac{\langle R \rangle}{R_S} - 1}. \quad (3.20)$$

Segue diretamente sua relação inversa,

$$\langle R \rangle = R_S(1 + A + \sqrt{A(1 + A)}) \quad (3.21)$$

onde

$$A = \frac{3(\eta - 1)^2 \langle p_o \rangle}{2\eta}. \quad (3.22)$$

Assim, quando em nossa teoria tivermos a probabilidade média, podemos obter o preço das ações das empresas. Os parâmetros R_S e η são ajustados com o comportamento temporal dos preços das ações que desejamos. Como exemplo, apresentamos na Fig. 3.11(a) a variação das ações da Telebrás na bolsa de valores de São Paulo nos dias úteis

do período de 1 de julho de 1992 (dia 0) à 17 de fevereiro de 1993 (dia 157). Para não considerar os efeitos da alta taxa da inflação brasileira no mesmo período, convertemos dia a dia o preço das ações para o dólar. Na Fig. 3.11(b) podemos ver a cotação do dólar em relação à moeda brasileira da época, e na Fig. 3.11 (c) o preço das ações da Telebrás já convertido em dólares. Nos gráficos (d) e (e) apresentamos a variação do preço da ação de uma grande empresa através do nosso modelo numa bolsa com uma e oito empresas, respectivamente, ajustando-se os parâmetros a fim de simular o caso da Telebrás.

Vê-se que na versão do modelo com apenas uma empresa as oscilações são de grande amplitude, não representando a realidade. Já na versão do modelo de bolsa com 8 empresas, os resultados passam a apresentar um aspecto qualitativamente semelhante.

3.3 Conclusões

Em resumo, concluímos do nosso modelo que:

- (i) A variedade de opiniões estabiliza o mercado de bolsas de valores. O risco de colapso do mercado de ações é menor com corretores humanos que com corretores informatas.
- (ii) A intervenção externa é importante para o equilíbrio do mercado, indicando que o mercado sem nenhum controle do Estado leva a um mercado de monopólios.
- (iii) A probabilidade de querer comprar e/ou vender (demanda e oferta potencial) está diretamente relacionada com o preço das ações (Eq. 3.20).

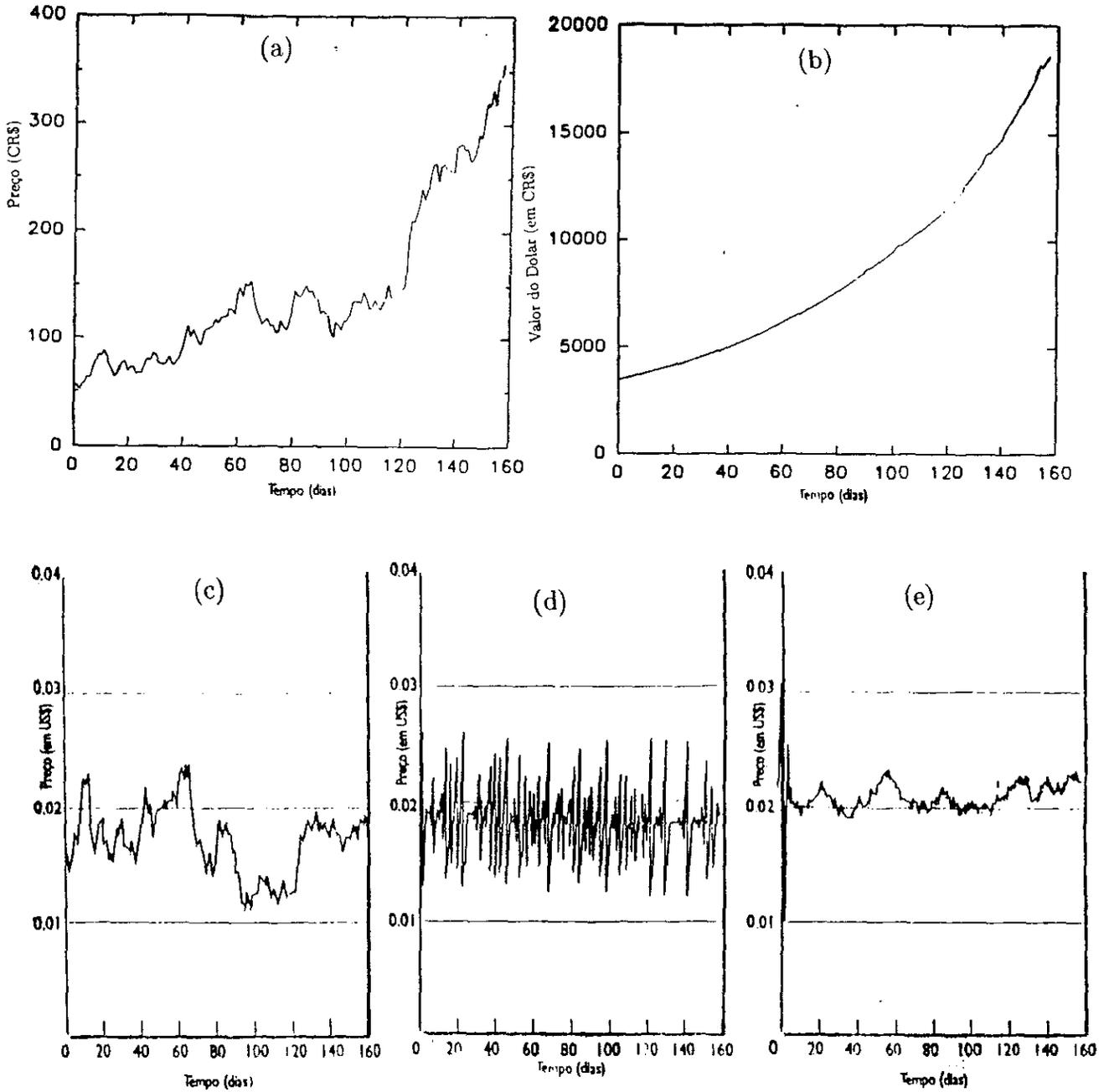


Figura 3.11: Variação do preço das ações de uma grande empresa. (a) Telebrás na bolsa de valores de São Paulo(em moeda brasileira). (b) Cotação do dolar em relação à moeda brasileira do período. (c) Telebrás na bolsa de valores de São Paulo(em dólares). (d) Modelo de uma bolsa com apenas uma empresa. (e) Modelo de uma bolsa com 8 empresas. Início (dia 0): 1 de julho de 1992. Fim (dia 157): 17 de fevereiro de 1993. Os dados dos gráficos (a) e (b) foram cortesia do Banco Francês e Brasileiro.

Terminamos o presente capítulo apresentando a seguinte observação do economista Keynes[78] em um fenômeno similar: “É interessante que a estabilidade de um sistema e sua sensibilidade na troca da quantidade de dinheiro deva depender da existência de uma variedade de opiniões sobre o que é incerto. O melhor seria conhecer o futuro. Mas, se não, caso queiramos controlar a atividade de um sistema econômico pela troca de quantidades de dinheiro, é importante que as opiniões difiram uma das outras. Assim, esse método de controle é mais precário nos Estados Unidos, onde as pessoas tendem a ter as mesmas opiniões ao mesmo tempo, que na Inglaterra, onde as diferenças de opinião são mais frequentes”.

PARTE 2

Capítulo 4

Mecânica Estatística Generalizada

4.1 Introdução

O grande sucesso da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs(BG) e sua conexão com a termodinâmica, induz-nos (erradamente!) acreditar na sua precisão e universalidade sobre todos os sistemas físicos. Em quase nenhum dos livros fundamentais em que aprendemos a mecânica estatística existe alguma citação sobre suas limitações ou eventuais inadequações.

A mecânica estatística de BG é essencialmente baseada na forma da entropia (S) igual a $-\sum_i p_i \ln p_i$ (maiores detalhes na próxima seção). A aditividade (ou extensividade) de S é uma regra fundamental para a sua adequação a sistemas físicos. Entretanto, a extensividade não é uma regra universal para todos os sistemas físicos, nem a forma da entropia de BG é única. Vejamos, por exemplo, as palavras de P. T. Landsberg em um

trabalho sobre buracos negros[79]:

“The failure of some thermodynamic results, normally taken to be standard for black hole and other nonextensive systems has recently been discussed. (...). If two identical black holes are merged, the presence of long-range forces in the form of gravity leads to a more complicated situation, and the merge black hole system one has to use $2M$, $2J$, $2Q$ and the relation between $S_b(2X)$ and $S_b(X)$ has to be investigated. It can in fact be show that $S_b(X_A+X_B) > S_b(X_A)+S_b(X_B)$. This means that entropy is “strictly superadditive”, (...). In any case, any treatment of “normal” thermodynamics should rule out long-range forces early on in the discussion. Anyone who wants to check carefully which parts of thermodynamics may, or may not, be used when long-range forces play a part will find little in the archival literature”.

Como este problema citado, existem muitos outros onde a mecânica estatística de BG não se aplica satisfatoriamente. São exemplos, sistemas gravitacionais[80], sistemas magnéticos de longo-alcance[81], difusão anômala[82], etc. Pode-se sumarizar como restrições básicas ao uso da mecânica estatística de BG às seguintes condições:

- Forças de curto alcance (ou ausência de forças).
- Processos com memória de curto alcance (ex.: Markovianos).
- Espaço-tempo não fractal.

Para sistemas físicos que não obedecem essas restrições, muitas vezes as somas, ou

integrals, que aparecem nos cálculos de quantidades termoestatísticas divergem. Consequentemente, ficamos impossibilitados de fazer comparações com dados experimentais (sempre finitos).

Destas considerações, torna-se clara a necessidade de uma extensão à estatística de BG, pois, vários sistemas físicos, onde não se aplicam as restrições citadas acima, estão impossibilitados de solução por falta de uma teoria adequada.

4.2 Mecânica Estatística Generalizada

A mecânica estatística nos dá uma ponte entre os comportamentos microscópico e macroscópico de sistemas físicos. A maximização da entropia baseada nas idéias de Boltzmann fundamenta a mecânica estatística e dá interpretação probabilística à entropia termodinâmica. A mecânica estatística de BG está baseada na entropia usual

$$S = -k_B \sum_i p_i \ln p_i. \quad (4.1)$$

Onde p_i representa a probabilidade de um certo estado microscópico estar ocupado. Usamos a condição de normalização das probabilidades

$$\sum_i p_i = 1. \quad (4.2)$$

Uma possibilidade de explicar os sistemas onde não se aplica a estatística de BG é

generalizar a entropia de BG que fundamenta a mecânica estatística, para que possamos englobar problemas com forças de longo-alcance e com processos de longa-memória.

Uma grande classe de formas de entropia são discutidas no campo da teoria de informação, contudo, o nosso interesse é a conexão com a física da natureza, portanto para que a generalização possa ter um sentido físico deve: (i) conter como caso particular a Termoestatística usual; (ii) satisfazer uma conexão consistente com uma termodinâmica generalizada; (iii) ser matematicamente coerente; (iv) provar ser útil em aplicações físicas.

Em 1988, C. Tsallis propôs uma generalização da entropia [2], inspirado nos multifractais, que vem sendo estudada cada vez mais por um maior número de pesquisadores, e tem mostrado satisfazer todas as condições de uma teoria que generaliza a mecânica estatística de BG.

O primeiro postulado do formalismo de Tsallis pode ser definido como:

Para um sistema com um número de estados microscópicos igual a W , com probabilidade p_i para i -ésimo estado, que satisfaz a condição de normalização $\sum_{i=1}^W p_i = 1$, com $p_i \geq 0$, define-se a entropia como:

$$S_q \equiv k \frac{1 - \sum_{i=1}^W (p_i)^q}{q - 1}, \quad (4.3)$$

ou em geral,

$$S_q \equiv k \frac{1 - \text{Tr } \rho^q}{q - 1}, \quad (4.4)$$

onde q e k são constantes reais e ρ corresponde ao operador densidade.

O segundo postulado consiste em definir o q -valor associado a uma medida experi-

mental de um observável \hat{O} , cujo valor no estado i é o_i . Seu valor associado é dado por

$$\langle \hat{O} \rangle_q \equiv \sum_{i=1}^W p_i^q o_i. \quad (4.5)$$

ou

$$\langle \hat{O} \rangle_q \equiv \text{Tr} \rho^q \hat{O}. \quad (4.6)$$

No caso do conjunto canônico, a energia interna é generalizada como

$$U_q \equiv \sum_{i=1}^W p_i^q \epsilon_i \quad (4.7)$$

ou em geral $U_q \equiv \text{Tr} \rho^q \mathcal{H} \equiv \langle \mathcal{H} \rangle_q$ onde $\{\epsilon_i\}$ corresponde ao espectro de energia, isto é, o conjunto de autovalores do Hamiltoniano \mathcal{H} .

Apesar do seu aspecto inusitado, o q -valor associado à medida não viola a teoria de probabilidades. Da Eq. 4.5 vemos que o q -valor esperado nada mais é que o valor médio usual de $\rho^{q-1} \hat{O}$. Isto é, uma média de um operador que depende de ρ , similar a entropia de BG que é $S = -k_B \text{Tr} \rho \ln \rho = -k_B \langle \ln \rho \rangle$.

4.2.1 Propriedades da Entropia de Tsallis

Seguindo, apresentaremos algumas das propriedades do novo formalismo.

1. A entropia generalizada é não negativa, isto é, $S_q \geq 0 \forall q$ e $\forall \{p_i\}$.

2. A entropia S_q é concava se $q > 0$ e convexa se $q < 0$. Esta propriedade segue diretamente da matriz Hessiana

$$\frac{\partial^2}{\partial p_i \partial p_j} (S_q - \lambda \sum_{i=1}^W p_i) = -q p_i^{q-2} \delta_{ij} \quad (4.8)$$

que é claramente negativa para $q > 0$ e positiva para $q < 0$. Assim a entropia generalizada é maximizável para $q > 0$ e minimizável para $q < 0$.

3. O limite $q \rightarrow 1$ restitui a estatística de BG. Vejamos: para q próximo de 1, a variável p_i^{q-1} também tem valores próximos de 1. Assim podemos aproximar a série logarítmica com $\ln p_i^{q-1} \sim 1 - p_i^{q-1}$, ou ainda, $p_i^{q-1} \sim 1 - (q-1)\ln p_i$. Portanto, substituindo essa aproximação em S_q

$$S_q \sim k \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i p_i^{q-1}}{q-1} \sim k \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i [1 - (q-1)\ln p_i]}{q-1} \quad (4.9)$$

e assim,

$$S_1 = -k \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i \quad (4.10)$$

que é a expressão da entropia de BG. De 4.5 segue $\langle O \rangle_1 = \sum_{i=1}^W p_i o_i$, que representa a média estatística usual. É fácil ver que a constante k pode ser identificada como a constante de Boltzmann k_B para $q = 1$.

4. A entropia S_q é não-extensiva.

Sejam dois sistemas \sum_1 e \sum_2 com probabilidades $\{p_i^{(1)}\}$ e $\{p_j^{(2)}\}$, $i = 1, 2, \dots, W_1$ e $j =$

1, 2, ..., W_2 , respectivamente. Se Σ_1 e Σ_2 são independentes, isto é, $p_{ij}^{(12)} = p_i^{(1)} p_j^{(2)}$, para $\{p_{ij}^{(12)}\}$ do novo sistema formado pelos dois sistemas anteriores ($\Sigma_1 + \Sigma_2$), então:

$$\frac{S_q(\Sigma_1 + \Sigma_2)}{k} = \frac{S_q(\Sigma_1)}{k} + \frac{S_q(\Sigma_2)}{k} + (1 - q) \frac{S_q(\Sigma_1)}{k} \frac{S_q(\Sigma_2)}{k} \quad (4.11)$$

$(q - 1)$ é a medida da pseudo extensividade do sistema. A entropia é extensiva apenas para $q = 1$. $S_q(\Sigma_1 + \Sigma_2)$ é menor (maior) que $S_q(\Sigma_1) + S_q(\Sigma_2)$ se $q > 1$ ($q < 1$).

5. Os q -valores esperados de um observável \hat{O} obedecem a seguinte lei de aditividade

$$\langle \hat{O} \rangle_q(\Sigma_1 + \Sigma_2) = \langle \hat{O} \rangle_q(\Sigma_1) + \langle \hat{O} \rangle_q(\Sigma_2) + (1 - q) [\langle \hat{O} \rangle_q(\Sigma_1) S_q(\Sigma_2) + \langle \hat{O} \rangle_q(\Sigma_2) S_q(\Sigma_1)] \quad (4.12)$$

ou ainda,

$$\frac{\langle \hat{O} \rangle_q(\Sigma_1 + \Sigma_2)}{1 + (1 - q) S_q(\Sigma_1 + \Sigma_2)} = \frac{\langle \hat{O} \rangle_q(\Sigma_1)}{1 + (1 - q) S_q(\Sigma_1)} + \frac{\langle \hat{O} \rangle_q(\Sigma_2)}{1 + (1 - q) S_q(\Sigma_2)} \quad (4.13)$$

6. O conjunto microcanônico tem equiprobabilidade.

Para provar isso, otimizaremos a entropia generalizada sob a condição de preservar a normalização das probabilidades. Introduzindo o parâmetro de Lagrange λ , temos

$$0 = \frac{\partial}{\partial p_i} (S_q - \lambda \sum_i p_i) = -\frac{q}{q-1} p_i^{q-1} - \lambda \quad (4.14)$$

portanto

$$p_i = \left(\frac{\lambda(1-q)}{q} \right)^{\frac{1}{i-1}} \quad (4.15)$$

que independe de i . Impondo o vínculo, chegamos imediatamente que $p_i = 1/W$.

7. A distribuição de probabilidades no conjunto canônico, fazendo a otimização de S_q sob os vínculos $\sum_i^W p_i = 1$ e $\sum_i^W p_i^q \epsilon_i = U_q$, como no ítem anterior, é:

$$p_i = \frac{[1 - \beta(1-q)\epsilon_i]^{1/(1-q)}}{Z_q} \quad (4.16)$$

com

$$Z_q \equiv \sum [1 - \beta(1-q)\epsilon_i]^{1/(1-q)}. \quad (4.17)$$

onde \sum soma apenas os níveis ϵ_i que satisfazem $1 - \beta(1-q)\epsilon_i \geq 0$ (ou seja, $p_i \geq 0$).

Em geral,

$$p_i = \frac{[1 - \beta(1-q)\mathcal{H}]^{1/(1-q)}}{Z_q} \quad (4.18)$$

com

$$Z_q \equiv \begin{cases} Tr[1 - \beta(1-q)\mathcal{H}]^{1/(1-q)} & \text{se } 1 - \beta(1-q)\mathcal{H} \geq 0 \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (4.19)$$

8. A estrutura das transformações de Legendre da termodinâmica é preservada para todo q , para um observável \hat{O} arbitrário com medida $\langle \hat{O} \rangle_q$ [83].

Em geral, podemos provar, definido os estados de energia ϵ_i que, se

$$U_q = \sum_{i=1}^W p_i^q \epsilon_i \quad (4.20)$$

temos

$$U_q = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{Z_q^{1-q} - 1}{1-q} \right) \quad (4.21)$$

Identificando a energia livre como

$$F_q \equiv U_q - TS_q \quad (4.22)$$

facilmente verificamos que

$$F_q = -\frac{1}{\beta} \left(\frac{Z_q^{1-q} - 1}{1-q} \right). \quad (4.23)$$

Identificando o parâmetro de Lagrange β como o associado ao termostato, com

$\beta \equiv 1/kT$, segue que

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S_q}{\partial U_q}. \quad (4.24)$$

9. Mostramos que as distribuições do tipo t de Student e do tipo r , bastante conhecidas na teoria estatística, podem ser obtidas otimizando a entropia generalizada, para uma variável contínua, preservando a normalização das probabilidades e o seu segundo momento[84] (ver Apêndice).

10. O teorema de Ehrenfest permanece invariante sob sua forma[85, 86].

$$\frac{\partial \langle \hat{O} \rangle_q}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{O}, \mathcal{H}] \rangle_q. \quad (4.25)$$

Consequentemente, $[\hat{O}, \mathcal{H}] = 0$ implica que $\langle \hat{O} \rangle_q$ é uma constante de movimento, e também $\langle \hat{O} \rangle_1$.

Atualmente tem sido grande o interesse pelas propriedades da estatística generalizada e além das já apresentadas acima, podemos citar resultados que foram generalizados para um q arbitrário: A equação de Von Neumann (invariante na forma para todo q)[86], equações de Langevin e Fokker-Plank [87], identidade de Callen[88], teorema H de Boltzmann[89], teorema de flutuação-dissipação[90], reciprocidade de Onsager[91], incerteza quântica[92], possível conexão com grupos quânticos[93], princípio de equipartição[94], dinâmica de resposta linear[95] e muitos outros.

Seus efeitos têm sido ilustrados em modelos simples tais como a partícula livre[96], o modelo de Ising[97], precessão de Larmor[86], rotor rígido[98], átomo de hidrogênio[99], oscilador harmônico[100], gás ideal clássico[101], condensação de Bose-Einstein[102], etc.

4.2.2 Aplicações Físicas

Como a generalização da entropia proposta por Tsallis implicou em uma generalização da mecânica estatística, faz-se necessário provar sua aplicabilidade a sistemas físicos para que se possa constatar sua utilidade física. Nos últimos anos, muitos trabalhos foram feitos

ao longo desta linha. O uso da estatística com q diferente da unidade tem apresentado vantagens substanciais para vários sistemas físicos.

A primeira proposta de se tratar a estatística de um sistema físico com $q \neq 1$ foi feita por Plastino e Plastino[103] aplicado a um modelo de sistema estelar (modelo com forças gravitacionais de longo-alcance). O modelo estudado[104] é conhecido por ter um resultado não físico para a massa do sistema, dentro da estatística de BG. A massa é infinita. A aplicação da estatística generalizada leva à finitude da massa se q for suficientemente diferente de 1 ($q < 7/9$).

A solução exata da equação de Vlasov dependente do tempo, associada com o modelo de 2 galaxias [105], corresponde precisamente a $q = -1$. O fato de $q = -1$ é consistente com a condição da compatibilidade da gravitação de Newton, em que a massa, energia e entropia são simultaneamente finitas, se $q < \frac{8-(D-2)^2}{8-(D-2)^2-2(D-2)}$ [106], onde D é a dimensão do sistema, e no caso de $D = 3$ temos $q < 7/9$.

Ainda sob sistemas estelares, dados observacionais da distribuição de velocidades peculiares de agregados de galaxias foram ajustados pela distribuição que se origina da estatística generalizada[107]. A concordância foi otimizada para $q \approx 0.23$. E recentemente, um modelo cosmológico foi apresentado com o uso da nova mecânica estatística[108].

Boghosian[109] mostrou que a estatística de Tsallis é capaz de explicar de maneira natural, através da maximização da entropia generalizada S_q para $q = 1/2$, os resultados para uma coluna de elétrons num plasma na fase de turbulência. Essa observação possibilita uma construção de uma descrição termodinâmica para turbulência em duas dimensões.

A função de distribuição apropriada para descrever o interior do plasma solar, explicando a taxa reduzida de neutrinos solares, foi obtida a partir da mecânica estatística generalizada por Kaniadakis e outros[110].

Liu e outros[111] tem mostrado, através de medidas experimentais, fortes evidências da existência de distribuições de velocidades não-Maxwellianas para elétrons num experimento de plasma. Eles usaram satisfatoriamente uma distribuição para ajustar os dados da forma $\exp[-(v/v_m)^m]$ com $m \geq 2$. Nós[112] discutimos a possibilidade de ajustar os dados experimentais, tão bem quanto a Ref. [111], com uma distribuição do tipo $[1 - (1 - q)(v/v_q)^2]^{q/(1-q)}$ com q e $v_q \equiv \lambda v_m$ fazendo o papel dos parâmetros de ajuste m e v_m . As duas formas funcionais são idênticas à distribuição normal no caso particular $m/2 = q = \lambda = 1$. A vantagem da nossa forma alternativa vem do fato dela emergir naturalmente do formalismo da estatística generalizada.

Finalmente, mencionamos que o presente formalismo tem sido usado com êxito em aplicações de métodos de otimização [113, 114], possível aplicação a sistemas biológicos auto-organizados[115], redes neurais[116], teoria de decisão financeira[117] e teoria de probabilidades e informação[118], entre outros.

A difusão anômala é uma das áreas que tem tido uma grande importância na elucidação do formalismo da mecânica estatística de Tsallis. Intensos estudos têm mostrado como o uso do novo formalismo pode explicar vários dos fenômenos existentes na difusão anômala que são de difícil explicação pela mecânica estatística usual de BG. Além do entendimento dos processos que envolvem o novo formalismo terem crescido com a sua aplicação à difusão anômala.

No próximo capítulo, apresentaremos uma proposta de aplicar a estatística generalizada ao problema da difusão anômala com distribuições tipo Lévy[119] e apresentaremos algumas considerações a cerca da vantagem do uso da estatística com $q \neq 1$ neste sistema. Na sequência, faremos uma proposta de experimento para que possa determinar q a partir da difusão anômala prevista experimentalmente em um tipo de mistelas[120].

Capítulo 5

Difusão Anômala do Tipo Lévy

5.1 Introdução

Processos difusivos onde há alterações no movimento Browniano clássico, são frequentemente chamados de anômalos, em oposição à difusão baseada nos estudos realizados por Einstein[16], que pela abrangência de aplicações práticas e solidez passou a chamar-se de *difusão normal*.

Ao contrário do claro entendimento em que se encontra a teoria da difusão normal, a teoria da difusão anômala está dando os seus primeiros passos. Somente a poucos anos tem se dado importância a essa área de pesquisa, com o crescente aumento de pesquisadores teóricos e experimentais em verificar as leis que regem seus eventos [82, 121].

Uma das dúvidas sobre esse tema é quais os mecanismos físicos que invalidam a difusão normal. Entretanto, pelo não entendimento da dinâmica dos processos envolvidos, são frequentes hipóteses “ad hoc” para explicá-los.

A fim de discutir esta questão, apresentaremos primeiro uma introdução sobre a difusão normal, reproduzindo uma das mais elegantes maneiras de obtê-la, derivando-a através da mecânica estatística de BG.

5.1.1 Difusão Normal

Trataremos aqui o modelo de caminhada aleatória de uma partícula num movimento uni-dimensional. O caso geral em d -dimensões tem tratamento semelhante.

Seja uma partícula que, por consequência de suas interações e seu meio, dê N saltos sucessivos ($N=1, 2, 3, \dots$) ao longo de uma reta. Estes saltos são randômicos e igualmente distribuídos ao longo das duas direções, direita e esquerda, com lei de distribuição igual a $p(x)$. Todos os saltos têm a mesma distribuição $p(x)$, entretanto, a posição de partida de cada salto é igual a posição de chegada do salto anterior. Ou seja, o primeiro salto tem distribuição $p(x)$ e parte do ponto $x = 0$, o segundo salto tem a mesma distribuição $p(x)$ mas realocaliza a posição $x = 0$ para o ponto atingido após o primeiro salto, e assim sucessivamente. Em outras palavras, o processo é Markoviano, tem curta memória microscópica, neste caso de apenas um salto.

Para ilustrar a obtenção da difusão normal via mecânica estatística, derivaremos a distribuição de um salto $p(x)$ através da maximização da entropia de BG

$$S = -k_B \int_{-\infty}^{\infty} dx p(x) \ln p(x) \quad (5.1)$$

impondo os vínculos

$$\int dx p(x) = 1 \quad (5.2)$$

e

$$\langle x^2 \rangle \equiv \langle x^2 \rangle_1 \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 p(x) = \sigma^2, \quad (5.3)$$

onde σ é o comprimento característico do problema. Sistemas onde σ é finito, são ditos de curta correlação.

Aplicando o método de multiplicadores de Lagrange, onde introduziremos os parâmetros α e β , encontramos a seguinte equação

$$0 = \ln p(x) + 1 + \alpha + \beta x^2. \quad (5.4)$$

Segue imediatamente que a distribuição otimizada é

$$p(x) = \frac{1}{Z_1} \exp^{-\beta x^2} \quad (5.5)$$

com

$$Z_1 \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \exp^{-\beta x^2} = \sqrt{\pi/\beta}, \quad (5.6)$$

onde já eliminamos o parâmetro α usando 5.5 na Eq. 5.2. Esta distribuição é conhecida como Gaussiana ou normal e é reconhecidamente a mais importante das distribuições para variáveis contínuas.

Substituindo $p(x)$ da Eq. 5.5 na Eq. 5.3 encontramos de modo direto que

$$\frac{1}{kT} \equiv \beta = \frac{1}{2\sigma^2}. \quad (5.7)$$

Seguindo este formalismo, podemos encontrar uma função distribuição $p(x)$ genérica que otimiza a entropia a partir da Eq. 5.1 sob o vínculo da Eq. 5.2 e condições auxiliares

$$\int F_i(x)p(x)dx = c_i. \quad i = 1, \dots, l \quad (5.8)$$

Da mesma forma que o caso anterior, ao aplicar os multiplicadores de lagrange $\lambda_1, \dots, \lambda_l$, teremos

$$F(p) = - \int p(x)[\ln(p(x)) + \lambda_1 + \lambda_2 F_2 + \dots + \lambda_l F_l]dx \quad (5.9)$$

e portanto

$$p(x) = \exp[-(1 + \lambda_1 + \lambda_2 F_2 + \dots + \lambda_l F_l)]. \quad (5.10)$$

A distribuição dada pela Eq. 5.5 é restituída para o caso particular em que $F_2 \equiv x^2$ e $F_i = 0$ se $i \neq 2$.

Após N saltos a distribuição será dada pelo produto de convolução das distribuições de um salto, em virtude da posição final ser a soma dos deslocamentos de cada salto.

Mais precisamente,

$$p_1(x, N) = p(x) * p(x) * p(x) * \dots * p(x) \quad (N \text{ fatores}) \quad (5.11)$$

onde $*$ denota o produto de convolução. A solução deste problema consiste da aplicação do teorema do limite central[119]. É fácil provar que a distribuição Gaussiana (Eq. 5.5) tem sua forma invariante sob convolução, e x escala com \sqrt{N} . Assim,

$$p_1(x, N) = \frac{1}{\sqrt{N}} p(x/\sqrt{N}) = \sqrt{\frac{\beta}{\pi N}} \exp^{-\beta x^2/N}. \quad (5.12)$$

Como consequência, $\langle x^2 \rangle (N) = \frac{NkT}{2}$ para $N=1, 2, 3, \dots$. Desde que $N = Dt$, onde t é o tempo e D^{-1} é o tempo característico do problema, reobtivemos o resultado de Einstein $\langle x^2 \rangle (t) = \frac{DkTt}{2}$ [16].

Ressaltamos que se por alguma razão os saltos não são precisamente Gaussianos, mas de forma a pertencer a classe de distribuições de curto alcance, isto é, $\langle x^2 \rangle$ finito, então, de acordo com o teorema do limite central, a Gaussiana corresponde a distribuição atratora no espaço das distribuições no limite $N \rightarrow \infty$. Portanto, no caso de sistemas com curta memória e com interação de curto alcance, teremos

$$p(x, N) \sim \frac{1}{\sqrt{N}} G(x/N^{1/2}; \Delta^G), \quad N \gg 1, \quad (5.13)$$

onde $G(y; \Delta^G)$ é a distribuição Gaussiana com segundo momento Δ^G (preservado sob a convolução)[119].

Esta idéia simples apresenta o motivo da abrangência das aplicações da difusão normal, pois ela é garantida pelo teorema do limite central para sistemas microscópicos que tenham memória e interação de curto alcance, uma vez que a distribuição Normal (Gaussiana) é

a atratora do espaço das distribuições.

5.1.2 Limites da Difusão Normal

É fácil ver da Eq. 5.8 que a condição para encontrar uma distribuição $p(x)$ como sendo uma exponencial de um polinômio de grau l é escolher $F_i \equiv x^i$ se $i \leq l$ e $F_i = 0$ se $i > l$.

Entretanto, não necessariamente $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$ de $p(x)$ são finitos. Por exemplo, podemos supor que $p(x)$ decresce para largos valores de x com $x^{-(1+\mu)}$ ($\mu > 0$). Assim, na situação em que $\mu > 2$, $\langle x^2 \rangle$ é finito e de acordo com o teorema do limite central teremos uma difusão normal. Mas, no caso de $1 < \mu < 2$, temos $\langle x^2 \rangle$ infinito! (Não teremos uma difusão normal).

Esta consideração é uma questão clássica da teoria de probabilidades e foi respondida por Lévy e Khintchine[119], que baseados na estabilidade das distribuições sob convoluções apresentaram um teorema do limite central generalizado que engloba as chamadas distribuições “largas” [119] onde $\langle x^2 \rangle$ diverge.

As novas distribuições limites são chamadas de distribuições de Lévy e são caracterizadas pelas suas funções características (transformada de Fourier de $p(x)$) dadas por

$$F(K, t) \rightarrow e^{-cte|k|^\gamma} \quad (5.14)$$

com $p(x) \approx x^{-(1+\mu)}$ para largos valores de x , onde $\gamma = \mu$ se $\mu \leq 2$ ou $\gamma = 2$ se $\mu \geq 2$.

Vamos mencionar alguns exemplos da distribuição de Lévy na física, além dos muitos

discutidos na ref. [82, 121]. Estas distribuições têm sido usadas para difusão em bilhares, mapas caóticos e difusão de sistemas turbulentos[122, 123], observações experimentais das distribuições de Lévy na difusão de certas moléculas anfífilas dissolvidas em água salgada[120], na análise de medidas de batidas do coração [124] e transporte caótico em fluxo de um fluido laminal de uma mistura de água-glicerol [125].

Além dos sistemas físicos citados, temos um enorme número de exemplos que levam a distribuições estatísticas com leis de potências. Entretanto, as diversas ferramentas teóricas que têm sido usadas, aplicadas a tais sistemas, não resolveram muitos dos problemas encontrados.

Distribuições com leis de potência para largos valores de x tal que $p(x) \approx Ax^{-\lambda}$ não podem ser encontradas via maximização da entropia de BG a menos que tenhamos, por exemplo, um número infinito de condições sob os momentos. Contudo isso não é possível pois essas distribuições não convergem para altos momentos[82].

Neste ponto podemos fazer dois tipos de análises para que possamos encontrar distribuições tipo leis de potência (Lévy) dentro do formalismo de maximização da entropia. Uma primeira possibilidade é encontrar vínculos $F_i(x)$ não triviais. Este ponto de vista foi bastante explorado por um grupo de físicos (por exemplo E. Montroll, M. Shlessinger [82]). Mas, mesmo entre eles não há consenso sobre como explicar, a não ser “ad hoc”, os fatores de escolha.

Outro ponto de vista, que será abordado neste trabalho, é utilizar o formalismo de otimização da entropia com vínculos nos primeiros momentos utilizando a entropia generalizada de Tsallis.

5.2 Superdifusão Anômala de Lévy Uni-Dimensional

Consistentemente com a Eq. 4.3 podemos definir

$$S_q[p] = k \frac{1 - \int_{-\infty}^{\infty} d(x/\sigma) [\sigma p(x)]^q}{q-1} \quad (q \in \mathfrak{R}) \quad (5.15)$$

obedecendo o vínculo dado pela Eq. 5.2 e pelo vínculo suplementar

$$\langle x^2 \rangle_q \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d(x/\sigma) x^2 [\sigma p(x)]^q = \sigma^2 \quad (5.16)$$

onde σ é um comprimento característico de valor finito. Agora, introduzindo os parâmetros de Lagrange, obteremos a solução otimizada para $p_q(x)$ como sendo

$$p_q(x) = \frac{[1 - \beta(1-q)x^2]^{1/(1-q)}}{Z_q} \quad (5.17)$$

onde

$$Z_q \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx [1 - \beta(1-q)x^2]^{1/(1-q)}. \quad (5.18)$$

Observamos que $\lim_{q \rightarrow 1 \pm 0} p_q(x)$ reproduz Eq. 5.5, e que o vínculo da normalização de $P_q(x)$ só é satisfeito para o intervalo $q \in [-\infty, 3)$. Fazendo o cálculo explícito para Z_q , no intervalo $1 < q < 3$, obtemos

$$p_q(x) = \sqrt{\frac{\beta(q-1)}{\pi}} \frac{\Gamma(\frac{1}{q-1})}{\Gamma(\frac{1}{q-1} - \frac{1}{2})} \frac{1}{[1 + \beta(q-1)x^2]^{1/(q-1)}} \quad (5.19)$$

e para o intervalo $-\infty < q < 1$,

$$p_q(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{\beta(1-q)}{\pi}} \frac{\Gamma(\frac{1}{1-q} + \frac{3}{2})}{\Gamma(\frac{1}{1-q} + 1)} [1 - \beta(1-q)x^2]^{1/(1-q)} & \text{if } |x| \leq \frac{1}{\sqrt{\beta(1-q)}} \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (5.20)$$

Na Fig. 5.1 ilustramos essas distribuições. Como já observamos no capítulo anterior, elas são equivalentes as distribuições t-Student para $1 \leq q \leq 3$, e r-Student para $-\infty \leq q \leq 1$.

Substituindo $p_q(x)$ na Eq. 5.16 encontramos que $1/kT \equiv \beta \equiv \Delta_q/\sigma^2$, onde

$$\Delta_q = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[\sqrt{\frac{q-1}{\pi}} \frac{\Gamma(\frac{1}{q-1})}{\Gamma(\frac{1}{q-1} - \frac{1}{2})} \right]^{2(q-1)/(3-q)} & \text{se } 1 < q \leq 3; \\ \frac{1}{2} & \text{se } q = 1; \\ \frac{1}{2} \left[\sqrt{\frac{1-q}{\pi}} \frac{\Gamma(\frac{1}{1-q} + \frac{3}{2})}{\Gamma(\frac{1}{1-q} + 1)} \right]^{2(q-1)/(3-q)} & \text{se } -\infty \leq q < 1. \end{cases} \quad (5.21)$$

Cálculos diretos mostram que

$$\langle x^2 \rangle_1 (1) \equiv \int dx x^2 p_q(x) = \frac{1}{\beta} A_q = kT A_q \quad (5.22)$$

com

$$A_q = \begin{cases} \frac{1}{5-3q} & \text{se } -\infty \leq q \leq 5/3; \\ \infty & \text{se } 5/3 < q \leq 3 \end{cases} \quad (5.23)$$

como também

$$\langle x^2 \rangle_q (1) \equiv \int d(x/\sigma) x^2 [\sigma p_q(x)]^q = \frac{1}{\beta} \Delta_q = kT \Delta_q. \quad (5.24)$$

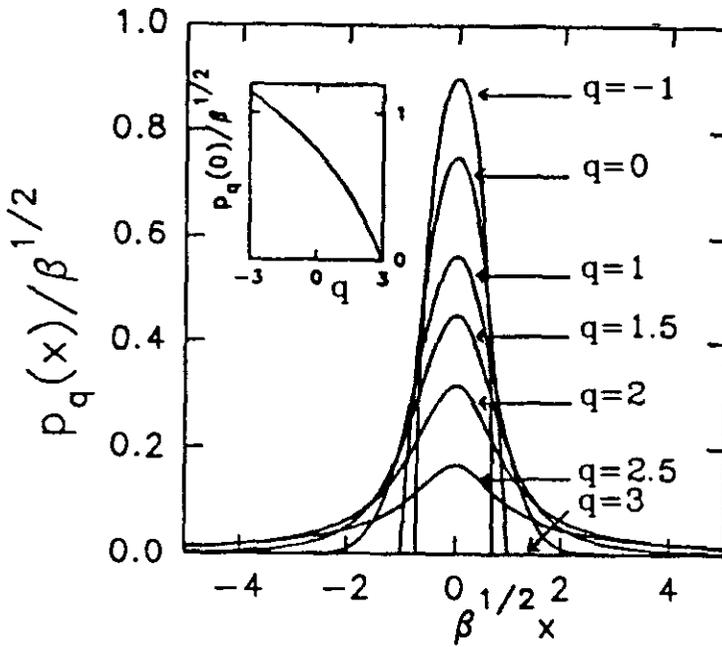


Figura 5.1: Distribuições com $d=1$ ($p_q(x)/\beta^{1/2}$) versus ($\beta^{1/2} x$) para valores típicos de q ($q=1$: Gauss; $q=2$: Lorentz; $q = -\infty$: distribuição delta de Dirac). Figura interna: Valores de $p_q(0)/\beta^{1/2}$ como função de q .

É importante comentar que esta definição difere da Eq. (16) da referência [18], na qual $\langle x^2 \rangle_q \equiv \int dx x^2 [p_q(x)]^q = \sigma^{3-q}$. Em [18] σ não está definido em unidades de comprimento (x), o que acarreta em resultados diferentes quanto a relação de $\langle x^2 \rangle_q$ e T .

Verificamos facilmente que $A_1 = \Delta_1 = 1/2$ (mostrados na Fig. 5.2). Podemos ver que $\langle x^2 \rangle_1$ é *finito* apenas para $-\infty \leq q < 5/3$, e *diverge* nos outros casos, enquanto que $\langle x^2 \rangle_q$ é *finito* no intervalo $5/3 \leq q \leq 3$.

Observemos que o caso $q = 2$ correspondente a distribuição de Lorentz (ou Cauchy) $p_2(x) = (\sqrt{\beta}/\pi)(1 + \beta x^2)^{-1}$; onde, $\langle x^2 \rangle_1 \propto \int_0^\infty dx x^2 (1 + \beta x^2)^{-1}$ *diverge*, enquanto que $\langle x^2 \rangle_2 \propto \int_0^\infty dx x^2 (1 + \beta x^2)^{-2}$ é *finito*. Em outras palavras, acabamos de mostrar que a termoestatística de BG ($q = 1$) *não pode* derivar a distribuição de Lorentz com base no

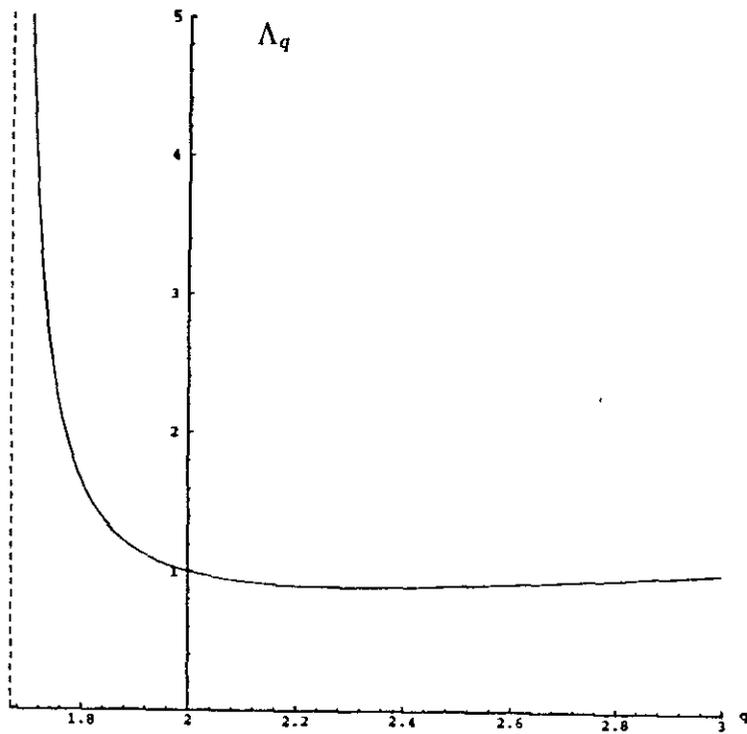


Figura 5.2: Dependência em q para Λ_q com $5/3 < q < 3$. Λ_q tem valor mínimo para $q=2.3199$ correspondente a $\Lambda_q=0.88954$.

formalismo variacional da entropia usando a priori vínculos simples (tal como $\langle x^2 \rangle_1$ finito), enquanto que para o uso do formalismo apresentado acima para $q \neq 1$ pode!

Para finalizar o problema de apenas um salto[126], apresentamos a transformada de Fourier $F_q(\kappa)$ da distribuição $p_q(x)$. Através do “software” MATHEMATICA [127] encontramos uma expressão analítica para $F_q(\kappa)$ em termos da função modificada de Bessel[119]. Seu comportamento no limite $\kappa \rightarrow 0$ é $F_q(\kappa) \sim \exp^{\Lambda_q |\kappa|^\gamma}$, com

$$\gamma = \begin{cases} 2 & \text{se } -\infty \leq q \leq 5/3; \\ \frac{3-q}{q-1} & \text{se } 5/3 < q < 3 \end{cases} \quad (5.25)$$

e

$$\Lambda_q = \begin{cases} \frac{1}{6(\frac{5}{3}-q)} & \text{se } -\infty \leq q \leq 5/3; \\ -\frac{\Gamma((q-3)/2(q-1))}{\Gamma((3-q)/2(q-1))} [4(q-1)]^{-(3-q)/2(q-1)} & \text{se } 5/3 < q < 3 \end{cases} \quad (5.26)$$

com $\Lambda_3 = 1$ (ver figura 5.2 [128]).

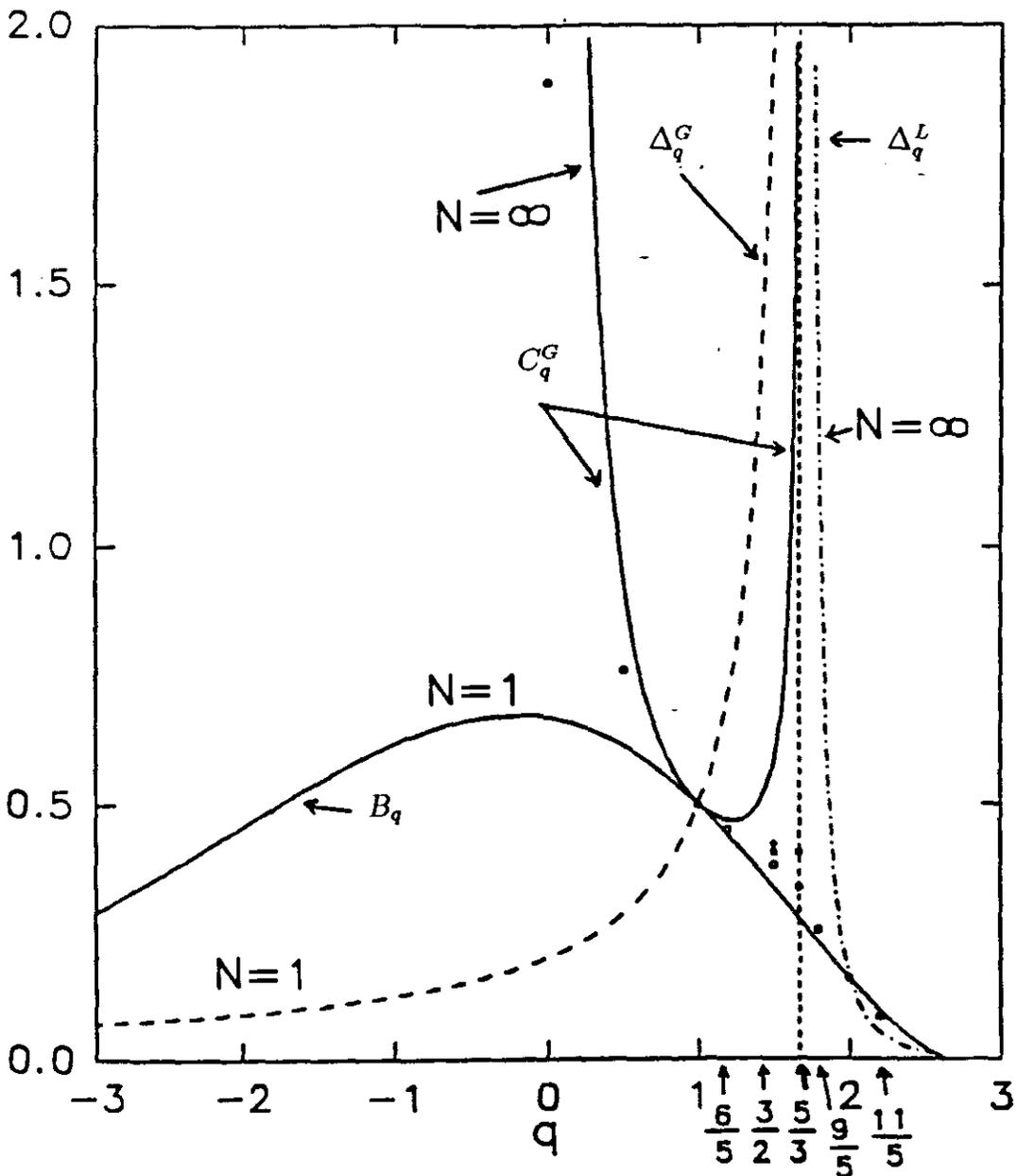


Figura 5.3: Dependência de q com $d = 1$ para vários valores de x^2 . $\Delta_q^G \equiv A_q \equiv \beta \langle x^2 \rangle_1(N)$ (linha cheia; G representa Gauss); $B_q \equiv \beta \langle x^2 \rangle_q(1)$ ($B_1 = 1/2$, $B_2 = 1/2\pi$ e B_q atinge seu valor máximo 0.6713 para $q \simeq -0.21$); $C_q^G \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \beta/(N)^{\frac{3-q}{2}} \langle x^2 \rangle_q(N)$; $\Delta_q^L \equiv D_q \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \beta/(N)^{q-1} \langle x^2 \rangle_q(N)$ (linha tracejada; L representa Lévy). Ambos Δ_q^G e Δ_q^L divergem em $q = 5/3$. Alguns pontos típicos também são indicados: $\beta/(2)^{3/2} \langle x^2 \rangle_0(2)$ para $q = 0$; $\beta/(2)^{5/4} \langle x^2 \rangle_{1/2}(2)$ para $q = 1/2$; $\beta/(2)^{9/10} \langle x^2 \rangle_{6/5}(2)$ para $q = 6/5$; $\beta/(2)^{3/4} \langle x^2 \rangle_{3/2}(2)$, $\beta/(3)^{3/4} \langle x^2 \rangle_{3/2}(3)$ e $\beta/(4)^{3/4} \langle x^2 \rangle_{3/2}(4)$ para $q = 3/2$; $\beta/(2)^{2/3} \langle x^2 \rangle_{5/3}(2)$ e $\beta/(3)^{2/3} \langle x^2 \rangle_{5/3}(3)$ para $q = 5/3$; $\beta/(2)^{4/5} \langle x^2 \rangle_{9/5}(2)$ para $q = 9/5$; $\beta/(2)^{6/5} \langle x^2 \rangle_{11/5}(2)$ para $q = 11/5$. Observemos que $(\beta/N) \langle x^2 \rangle_1(N) = 1/2$ e $(\beta/N) \langle x^2 \rangle_2(N) = 1/2\pi$ para todos valores de N , e também que $(\beta/N) \langle x^2 \rangle_1(N)$ diverge para $q \geq 5/3$ para todos valores de N e que $\lim_{N \rightarrow \infty} \beta/(N)^{\frac{3-q}{2}} \langle x^2 \rangle_q(N)$ diverge para $q \leq 0$.

Discutiremos agora o problema de N-saltos. A distribuição é dada por

$$p_q(x, N) = p_q(x) * p_q(x) * \dots * p_q(x) \quad (\text{N fatores}) \quad (5.27)$$

Para os casos $q = 1$ (distribuição Gaussiana) e $q = 2$ (distribuição Lorentziana) o resultado é trivial, pois as distribuições são invariantes na forma sob convolução. Para $q = 1$, $p_1(x, N)$ é dado pela Eq. 5.13. Para $q = 2$, temos

$$p_2(x, N) = \frac{\sqrt{\beta}}{\pi} \frac{N}{N^2 + \beta x^2} \quad (\forall N) \quad (5.28)$$

e x escala com N .

Se $q \neq 1, 2$, o resultado para $p_q(x, N)$ é não trivial para um N arbitrário. Contudo, o regime assintótico $N \gg 1$ pode ser analisado através dos teoremas do limite.

Para $q < 5/3$, $\langle x^2 \rangle_1$ é finito e portanto aplicamos *teorema do limite central*. Este caso já foi discutido acima e encontramos que a distribuição assintótica é a *Gaussiana*, dada pela Eq. 5.13.

Vê-se diretamente que

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle_1(N) &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} d(x/\sigma) x^2 [\sigma p_q(x, N)] \\ &= \frac{N}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dy y^2 [G_q(y)] = D_q^G kTN \end{aligned} \quad (5.29)$$

onde $D_q^G = 1/(5 - 3q)$.

Agora, no intervalo $5/3 < q < 3$, $\langle x^2 \rangle_1$ *diverge*, então deveremos aplicar o *teore-*

ma geral do limite central [119]. Como já apresentamos na seção anterior, neste caso a distribuição atratora é a distribuição de Lévy $L_\gamma(y)$ ao invés da Gaussiana.

Como o comportamento a longas-distâncias de $p_q(x)$ é dado por $1/|x|^{2/(q-1)}$, segue que no limite $N \rightarrow \infty$

$$p_q(x, N) \sim \frac{\sqrt{\beta}}{N^{1/\gamma}} L_\gamma((\sqrt{\beta}/N^{1/\gamma}) x) \quad (5/3 < q < 3) \quad (5.30)$$

onde identificamos os expoentes $2/(q-1) = 1 + \gamma$, e assim $\gamma = \frac{3-q}{q-1}$, como visto na Eq. 5.25.

Na Fig. 5.2(a) mostramos um diagrama esquemático das regiões encontradas.

Vamos nos ater ao estudo de $\langle x^2 \rangle_q(N)$ para que possamos entender melhor o problema de difusão anômala. Da Fig. 5.2 e pelas Eqs. 5.25 e 5.30 podemos ver no caso de $N \gg 1$ que:

(I) $q < 5/3$

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle_q(N) &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} d(x/\sigma) x^2 [\sigma p_q(x, N)]^q \\ &\sim \frac{N^{(3-q)/2}}{\beta^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dy y^2 [G_q(y)]^q = C_q^G kT N^{\delta(q)} \end{aligned} \quad (5.31)$$

com (ver Fig. 5.2)

$$\delta(q) = \frac{3-q}{2} \quad (-\infty \leq q \leq 5/3) \quad (5.32)$$

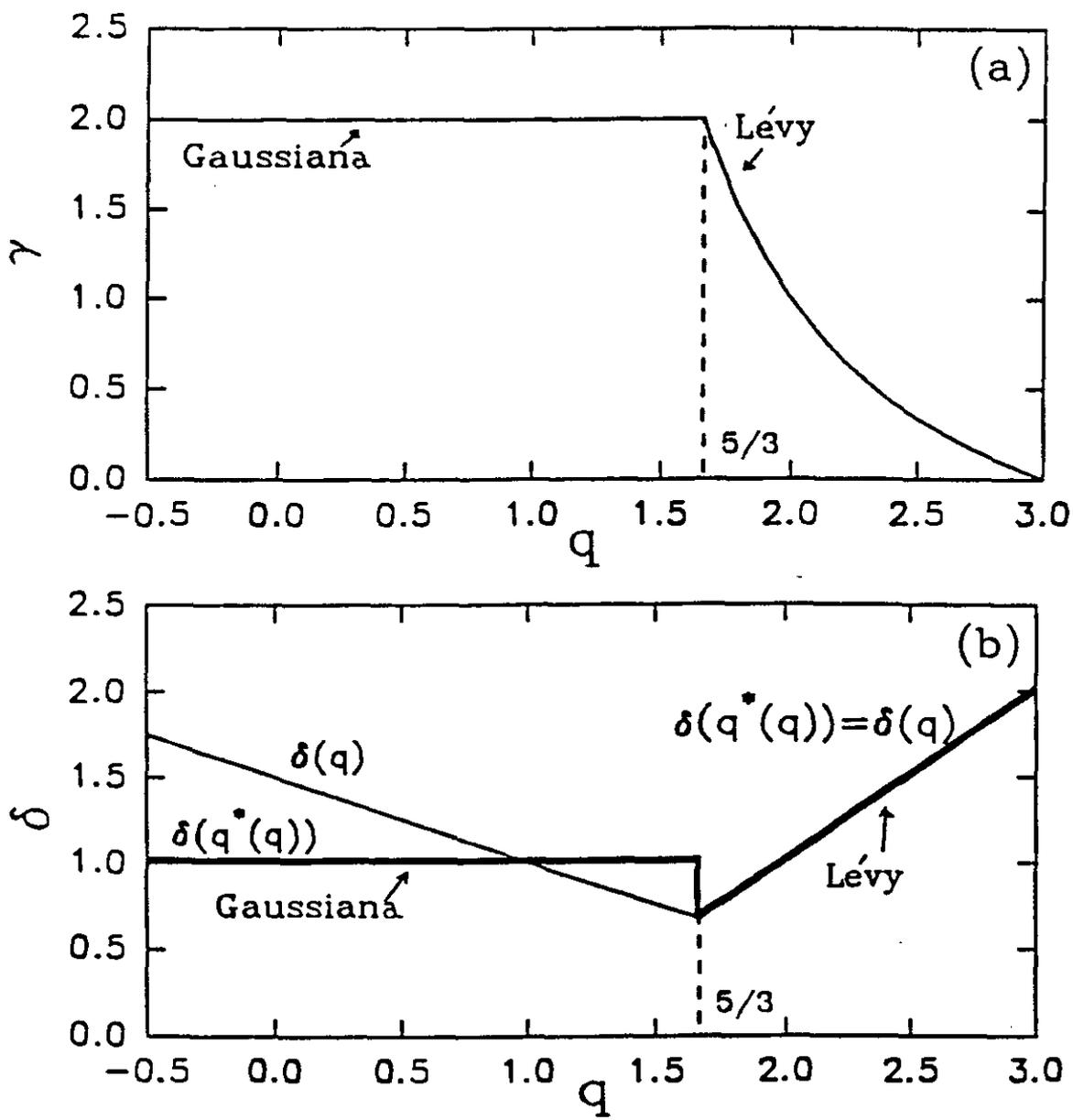


Figura 5.4: Dependência em q para $d = 1$ de: (a) γ (x escala como $N^{1/\gamma(q)}$ para $N \gg 1$); (b) δ ($\langle x^2 \rangle_q \propto TN^{\delta(q)}$, para $N \gg 1$; $\delta(q)$ é igual a $(3-q)/2$ se $q \leq 5/3$ e igual a $(q - 1)$ para $q \geq 5/3$; q^* representa o atrator que é igual a 1 se $q < 5/3$ e q se $q > 5/3$).

e com (ver Fig. 5.1)

$$C_q^G = \begin{cases} \infty & \text{if } -\infty \leq q \leq 0; \\ \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{q-1} q^3 (5-3q)^{3-q}}} & \text{if } 0 < q < 5/3 \end{cases} \quad (5.33)$$

Para o caso particular de $q = 0$, provamos facilmente que a resposta exata é dada por

$$\langle x^2 \rangle_0 (N) = \frac{2^{3N-2}}{3N^{3/2}} \quad (N = 1, 2, \dots) \quad (5.34)$$

(II) $q > 5/3$

Esta é uma situação mais complexa pois o atrator das distribuições não é mais uma Gaussiana, e sim uma distribuição de Lévy. Da Eq. 5.30 encontramos:

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle_q (N) &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} d(x/\sigma) x^2 [\sigma p_q(x, N)]^q \\ &\sim \frac{N^{(3-q)/\delta(q)}}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dy y^2 [L_{\gamma(q)}(y)]^q \\ &\equiv D_q^L k T N^{\delta(q)} \end{aligned} \quad (5.35)$$

com (ver Fig. 5.2(b))

$$\delta(q) = \frac{3-q}{\gamma(q)} = q - 1 \quad (5/3 < q \leq 3) \quad (5.36)$$

onde a expressão analítica de D_q^L não foi possível calcular. Fizemos um estudo numérico do intervalo $q \in [5/3, 3]$ e nossos resultados estão apresentados na Fig. 5.2; para os casos

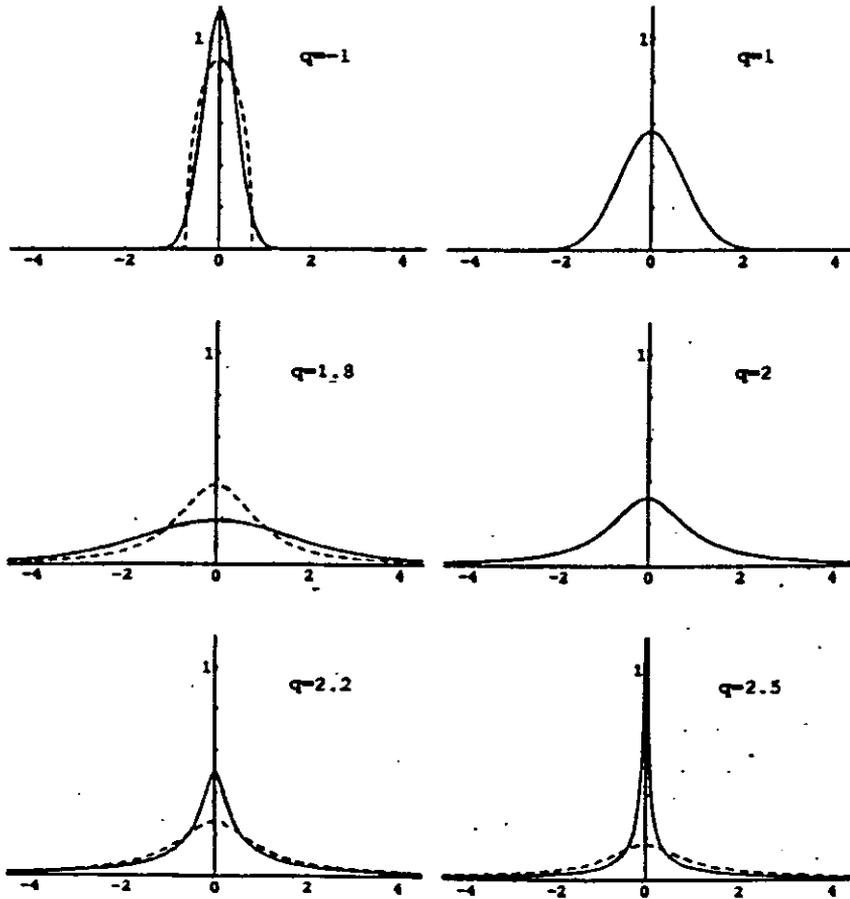


Figura 5.5: $p_q(x, N)$ para casos típicos. Linhas cheias representam o caso $N=1$, e linhas tracejadas representam o caso $N \rightarrow \infty$.

particulares $q = 5/3$ encontramos $D_{5/3}^L = \infty$, $q = 2$ encontramos $D_2^L = 1/2$ e para $q = 3$ encontramos $D_3^L = 0$. O caso $q = 3$ apresenta uma natureza “balística” em decorrência de $\delta(3) = 2$ (isto é, $\langle x^2 \rangle_3(N) \propto N^2$).

Nas figuras 5.2 e 5.6 mostramos um exemplo da evolução para o seu atrator de uma distribuição $p_q(x, N)$.

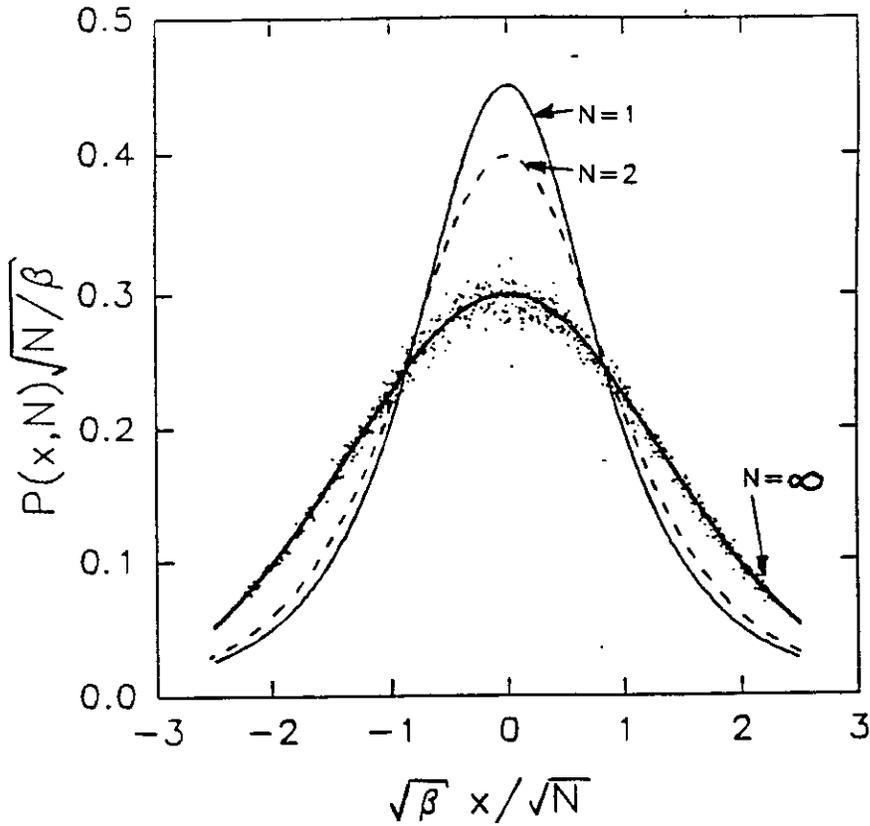


Figura 5.6: Reescala de N para $p_q(x, N)$ com $q=3/2$: $p_{3/2}(\beta^{1/2}x, 1)/\beta^{1/2} = \frac{4}{\pi} \frac{(2)^{1/2}}{(2+\beta x^2)^2}$, $2^{1/2} p_{3/2}(\beta^{1/2}x, 2)/\beta^{1/2} = \frac{64}{\pi} \frac{\beta x^2 + 80}{(\beta x^2 + 16)^3}$, $\lim_{N \rightarrow \infty} N^{1/2} p_{3/2}(\beta^{1/2}x, N)/\beta^{1/2} = \frac{1}{\pi^{1/2}} e^{-\beta x^2}$ (para todos os valores de $q < 5/3$, a reescala da largura $\langle x^2 \rangle_1$ é preservada com o aumento de N ; os pontos foram obtidos através de simulação computacional para $N=100$).

5.3 Superdifusão Anômala de Lévy d-Dimensional

A extensão do estudo para o caso d-dimensional seguirá essencialmente o caso $d = 1$ tratado na seção anterior. Observamos que analisaremos aqui apenas o problema isotrópico. Consideremos o entropia generalizada

$$S_q[p] = \frac{1 - \Omega_d \int_0^\infty d(\tau/\sigma) (\tau/\sigma)^{d-1} [\sigma^d p(\tau)]^q}{q - 1} \quad (q \in \mathfrak{R}) \quad (5.37)$$

onde Ω_d é a hipersuperfície esférica unitária em d dimensões ($\Omega_1 = 2, \Omega_2 = 2\pi, \Omega_3 = 4\pi$).

O primeiro vínculo é:

$$\Omega_d \int_0^\infty dr r^{d-1} p(r) = 1 \quad (5.38)$$

e o segundo

$$\langle r^2 \rangle_q \equiv \Omega_d \int_0^\infty d(\tau/\sigma) (\tau/\sigma)^{d-1} r^2 [\sigma^d p(r)]^q = \sigma^2. \quad (5.39)$$

Fazendo a otimização temos

$$p_q(r) = \frac{[1 - \beta(1 - q)r^2]^{1/(1-q)}}{Z_q} \quad (5.40)$$

onde

$$Z_q \equiv \Omega_d \int_0^\infty dr r^{d-1} [1 - \beta(1 - q)r^2]^{1/(1-q)}. \quad (5.41)$$

O comportamento a longas distâncias para $p_q(r)$ é dado por $1/r^{2/(q-1)}$ ($q > 1$). Portanto, podemos concluir que o vínculo da Eq. 5.38 é satisfeito na seguinte condição : $q < q_{max} \equiv$

$(2 + d)/d$. Também, temos que $\langle r^2 \rangle_1$ é *finito* no intervalo $q < q_c \equiv (4 + d)/(2 + d)$ e *diverge* para $q \geq q_c$. Semelhante ao caso $d = 1$, para $q \geq q_c$, identificamos $1/r^{\frac{2}{q-1}}$ com $1/r^{d+\gamma}$, que é o comportamento a longas-distâncias da distribuição de Lévy, portanto $2/(q - 1) = d + \gamma$. Finalizando, se considerarmos N-saltos com $N \gg 1$, o atrator é uma Gaussiana se $-\infty \leq q < q_c$ e uma distribuição de Lévy se $q_c < q < q_{max}$; conseqüentemente, a Eq. 5.25 é generalizada para

$$\gamma = \begin{cases} 2 & \text{se } -\infty \leq q \leq q_c \equiv \frac{4+d}{2+d}; \\ \frac{2}{q-1} - d & \text{se } q_c \leq q < q_{max} \equiv \frac{2+d}{d} \end{cases} \quad (5.42)$$

como podemos ver representada na Fig. 5.3.

O caso particular correspondente a distribuição de Lorentz é encontrado para $\gamma = 1$, deste modo $q_L = (3 + d)/(1 + d)$.

5.4 Uma Proposta Experimental

Como já nos referimos anteriormente, a proposta de uma nova mecânica estatística deve poder ser testada experimentalmente, e neste caso, a mecânica estatística generalizada por Tsallis, onde nos baseamos para analisar a difusão anômala, e onde a mecânica estatística de BG não se aplica, deve ser checada experimentalmente. A partir das considerações teóricas apresentadas, apresentaremos a seguir uma proposta de experimento.

Seja um parâmetro externo s de um dado sistema físico que regulará o regime de difusão entre a normal e a superdifusão de Lévy. Por exemplo, na referência [120], os

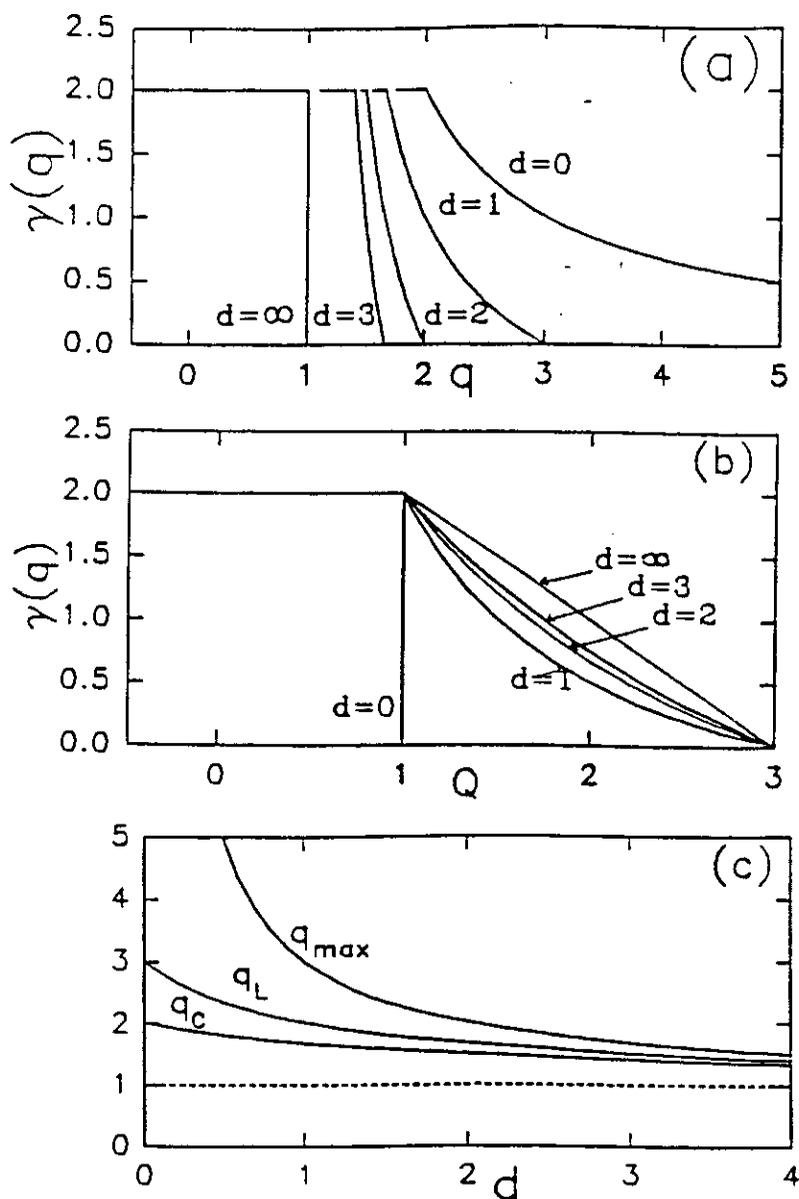


Figura 5.7: (q,d) -Dependência de γ : (a) γ versus q para valores típicos de d ; (b) γ versus $Q \equiv 1 - \frac{d(4+d)}{2} + \frac{d(2+d)}{2}q$ (observar que no limite $d \rightarrow \infty$ temos $\gamma = 3 - Q$ para $Q > 1$); $Q=2$ implica que $\gamma = d/(1+d)$; (c) d -dependência de q_{max}, q_L e q_c

autores apresentam um experimento com misturas onde podemos ver estes regimes. Neste caso s poderia ser a concentração de CTBA (ver Ref. [120]). Vamos considerar que para s abaixo (acima) de um valor crítico s_c o regime é uma distribuição Gaussiana (Lévy). Consideraremos a possibilidade de fazermos medidas experimentais do movimento das misturas durante um longo período de tempo (esta situação esta descrita na ref. [120]). Após este período, faz-se-a um histograma para obter a lei de probabilidades para $p_s(x, N)$. Então, representando os dados através de um gráfico, obtem-se uma relação $N^{1/\gamma(s)}p_s(x, N)$ versus $x/N^{1/\gamma(s)}$. Finalmente, a função $\gamma(s)$ pode ser obtida através de um ajuste dos dados.

Assim, espera-se que $\gamma = 2$ para todos os valores de $s < s_c$, e que γ deva decrescer abaixo de 2 com o crescimento de s acima s_c . A relação $q^* = (3 + \gamma(s))/(1 + \gamma(s))$, ou sua análoga para $d > 1$, irá mostrar $q^*(s)$. Esperamos que a constante de difusão D_q^G associada com $\langle x^2 \rangle_1(N)$ seja divergente no limite $s \rightarrow s_c - 0$, e que a constante de difusão D_q^L associada com $\langle x^2 \rangle_q(N)$ seja divergente no limite $s \rightarrow s_c + 0$. Se não existir nenhuma correlação entre sucessivos saltos, os expoentes críticos associados às divergências devem ser 1 e 2/3, respectivamente. Naturalmente, a existência de correlações poderá modificar os valores destes expoentes.

5.5 Conclusões

Demostramos neste capítulo que a aplicação da mecânica estatística generalizada ao

estudo da difusão, possibilita-nos unificar, dentro de um mesmo quadro, as difusões *normal* e anômala *típo Lévy*.

Ao otimizar a entropia generalizada com a distribuição de saltos de uma partícula (mantendo vinculada a normalização da distribuição e o seu momento), encontramos para o caso uni-dimensional: (i) $-\infty \leq q < 5/3$ implica em saltos de curto alcance (assim $\gamma(q) = 2$ e $\langle x^2 \rangle_1 \propto T$ é *finito*); (ii) $5/3 < q \leq 3$ implica em saltos de longo alcance (assim, $\gamma(q) = (3 - q)/(q - 1)$, $\langle x^2 \rangle_1$ *diverge*, mas $\langle x^2 \rangle_q \propto T$ é *finito*).

O problema de muitos saltos, em outras palavras, a difusão macroscópica ($N \rightarrow \infty$, portanto $t \rightarrow \infty$), é *robusta* e determinada pelo teorema do limite central generalizado. (i) para $-\infty \leq q < 5/3$, o atrator no espaço das distribuições é a *Gaussiana*, x escala como \sqrt{N} , e $\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\langle x^2 \rangle_1(N)}{N} \propto T$ é *finito* e aumenta monotonamente entre zero e infinito quando q cresce de $-\infty$ até $5/3$; (ii) para $5/3 < q < 3$, o atrator é a distribuição de *Lévy* $L_\gamma(y)$, x escala como $N^{1/\gamma(q)}$, e $\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\langle x^2 \rangle_q(N)}{N^{1/\gamma(q)}} \propto T$ é *finito* e decresce monotonamente de infinito à zero quando q cresce de $5/3$ até 3 (ver figura 5.5).

Este fato mostra uma analogia com as transições de fases onde, por exemplo, a susceptibilidade diverge num certo ponto crítico (em ambos os lados).

Aqui, a quantidade $\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\langle x^2 \rangle_{q^*}(N)}{N^{1/\gamma(q^*)}}$ (q^* refere-se ao atrator, i.e., $q^* = 1$ quando é uma distribuição Gaussiana, e $q = q^*$ quando é uma distribuição de Lévy) apresenta exatamente o mesmo comportamento como função de $q \in [-\infty, 3]$, ocorrendo uma divergência no “ponto crítico” $q = 5/3$ (onde a média $\langle x^2 \rangle_1$ de um salto simples diverge).

Concluimos observando que a aplicação da estatística generalizada á processos difusivos anômalos tem sido bastante explorada, onde podemos citar os trabalhos realizados por

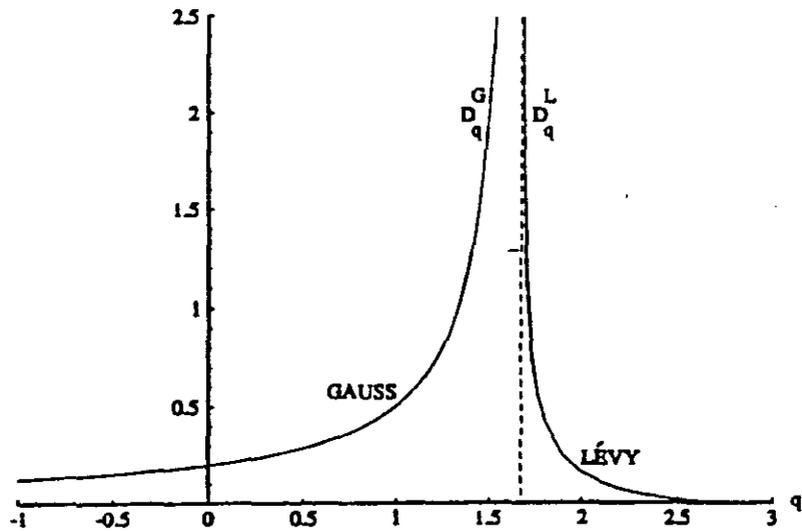


Figura 5.8: Coeficientes de difusão D_q^G e D_q^L para $-1 < q < 3$. Para $q \rightarrow \frac{5}{3} + 0$ temos $D_q^L \sim 0.1211(q - \frac{5}{3})^{-2/3}$. Para $q \rightarrow \frac{5}{3} - 0$ temos $D_q^G \sim \frac{1}{3}(\frac{5}{3} - q)^{-1}$.

Alemaný e Zanette[126, 129] sobre a difusão anômala com distribuições de Lévy e o trabalho de Tsallis e Bukman[130] que resolvem exatamente uma equação de Fokker-Plank não-linear baseados na forma da entropia generalizada.

Conclusão

Em resumo, concluimos no nosso trabalho que:

A aplicação do modelo de Hubbard ao fulereno sugere a tendência de encontrarmos ferromagnetismo em fulerenos dopados com agentes que produzem forte interação efetiva elétron-elétron. Apresentamos nossa conjectura sobre o comportamento magnético do fulereno como função da concentração de elétrons para o limite de forte acoplamento eletrônico.

No modelo aplicado à biologia exploramos as propriedades estatísticas encontradas nas diferentes regiões dos ácidos nucleicos e mostramos que a formação de laços nas sequências de nucleotídeos favorecem a interação entre nucleotídeos distantes, promovendo a correlação de longo-alcance.

No modelo aplicado à economia apresentamos resultados quantitativos que demonstram o efeito estabilizante da variedade de opiniões no mercado de ações.

Com a aplicação da mecânica estatística generalizada ao estudo da difusão, unificamos dentro de um mesmo quadro, as difusões normal e tipo Lévy. Apresentamos uma proposta experimental a partir das considerações teóricas apresentadas, fazendo uma analogia com

as transições de fases.

Como comentário final, possíveis extensões do nosso trabalho seriam:

i) No estudo da estrutura eletrônica do fulereno através do modelo de Hubbard estender os resultados numéricos via diagonalização direta para diferentes números de elétrons, tanto quanto possível, e utilizar métodos perturbativos, verificando nossa conjectura sobre o magnetismo deste sistema

ii) Para sequências de nucleotídeos explorar no modelo outros fatores responsáveis possivelmente pela correlação de longo-alcance, como, por exemplo, as mutações, e suas consequências em termos de evolução biológica.

iii) Para o mercado de ações mencionamos que o presente modelo simplificado pode ser naturalmente estendido a modelos mais realistas ao longo das seguintes linhas: a) O termo do tipo $\beta_i \frac{1}{N-1} \sum_{j \neq i}^N p_{jl}$ pode ser generalizado para $\frac{1}{N-1} \sum_{j \neq i}^N \beta_{ij} p_{jl}$ (analogamente para o termo γ); b) Possibilitar a cada corretor, comprar ações, vender ações, e não vender nem comprar ações; c) A população de cada tipo de corretor formados por, digamos, dois constituintes, por exemplo, corretores “informatas” e “humanos”.

iv) Na difusão generalizada será interessante estudar a sua conexão com generalizações da equação de Fokker-Plank com derivadas fracionárias, e relacionar os saltos com a possível estrutura fractal do espaço-tempo destes sistemas.

Apêndice A

Distribuições t de Student e r

Ao otimizar $S_q[p]$ com os vínculos dados pelas Eq. 5.2 e 5.16, concluímos diretamente que

$$p(x) = \frac{[1 - \beta(1 - q)x^2]^{1/(1-q)}}{\int dx [1 - \beta(1 - q)x^2]^{1/(1-q)}}. \quad (\text{A.1})$$

Analisemos separadamente os casos $q > 1$ e $q < 1$.

$q > 1$:

A Eq. A.1 torna-se

$$p(x) = \frac{[1 + \beta(q - 1)x^2]^{1/(1-q)}}{\int_{-\infty}^{\infty} dx [1 + \beta(q - 1)x^2]^{1/(1-q)}} \\ = \sqrt{\frac{\beta(q - 1)}{\pi}} \frac{\Gamma(\frac{1}{q-1})}{\Gamma(\frac{1}{q-1} - \frac{1}{2})} \frac{1}{[1 + \beta(q - 1)x^2]^{1/(q-1)}} \quad (1 < q < 3). \quad (\text{A.2})$$

(relembramos que $p(x)$ não é normalizada se $q \geq 3$).

Introduzindo a relação:

$$q \equiv \frac{3+m}{1+m} \quad (0 < m < \infty) \quad (\text{A.3})$$

obtemos

$$p(x) = \sqrt{\frac{2\beta}{\pi(1+m)}} \frac{\Gamma(\frac{1+m}{2})}{\Gamma(\frac{m}{2})} \frac{1}{(1 + \frac{2\beta}{1+m}x^2)^{\frac{1+m}{2}}}. \quad (\text{A.4})$$

Agora, definindo

$$y \equiv \sqrt{\frac{2\beta m}{1+m}} x, \quad (\text{A.5})$$

obtemos

$$\begin{aligned} \phi_m^{(t)}(y) &= \sqrt{\frac{1+m}{2\beta m}} p\left(y\sqrt{\frac{1+m}{2\beta m}}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi m}} \frac{\Gamma(\frac{1+m}{2})}{\Gamma(\frac{m}{2})} \frac{1}{(1 + \frac{y^2}{m})^{\frac{1+m}{2}}}, \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

que é precisamente a distribuição *t de Student com m graus de liberdade* (ver Ref. [131]).

No limite $q \rightarrow 1$ (i.e., $m \rightarrow \infty$), encontramos a distribuição Gaussiana.

$q < 1$:

A Eq. A.1 torna-se

$$p(x) = \frac{[1 - \beta(1-q)x^2]^{1/(1-q)}}{\int_{-1/\sqrt{\beta(1-q)}}^{1/\sqrt{\beta(1-q)}} dx [1 - \beta(1-q)x^2]^{1/(1-q)}}$$

$$= \sqrt{\frac{\beta(1-q)}{\pi}} \frac{\Gamma(\frac{1}{1-q} + \frac{3}{2})}{\Gamma(\frac{1}{1-q} + 1)} [1 - \beta(1-q)x^2]^{1/(1-q)} \quad (-\infty < q < 1). \quad (\text{A.7})$$

Esta distribuição é nula para valores de $|x| \geq [\beta(1-q)]^{-1/2}$.

Se introduzirmos

$$q \equiv \frac{n-6}{n-4} \quad (4 < n < \infty) \quad (\text{A.8})$$

temos

$$p(x) = \sqrt{\frac{2\beta}{\pi(n-4)}} \frac{\Gamma(\frac{n-1}{2})}{\Gamma(\frac{n-2}{2})} [1 - \frac{2\beta}{n-4}x^2]^{\frac{n-4}{2}}. \quad (\text{A.9})$$

Agora, definindo

$$r \equiv \sqrt{\frac{2\beta}{n-4}}x, \quad (\text{A.10})$$

obtemos

$$\begin{aligned} \phi_n^{(r)}(r) &= \sqrt{\frac{n-4}{2\beta}} p\left(\sqrt{\frac{n-4}{2\beta}}r\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(\frac{n-1}{2})}{\Gamma(\frac{n-2}{2})} (1-r^2)^{\frac{n-4}{2}} \quad (|r| \leq 1), \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

que é precisamente a distribuição r com $n-2$ graus de liberdade (ver Ref. [131]). No limite $q \rightarrow 1$ (i.e., $n \rightarrow \infty$), encontramos novamente a distribuição Gaussiana. No limite $q \rightarrow -\infty$ (i.e., $n \rightarrow 4$), obtemos a distribuição delta-de-Dirac.

Referências

- [1] L.D.Landau and E.M.Lifshitz. “Statistical Physics”, Addison-Wesley, Reading Mass., 1969.
- [2] C. Tsallis. J. Stat. Phys. **52**, 479(1988).
- [3] D. C. Mattis. *The theory of magnetism I: statics and dynamics* (Spring-Verlag, Berlin, 1981).
- [4] A. M. C. de Souza, C. Tsallis and A. M. Mariz, Phys. Rev. B **47**, 11940(1993).
- [5] A. M. C. de Souza, Phys. Rev. B **48**, 3744(1993).
- [6] A. M. Mariz, A. M. C. de Souza and C. Tsallis, J. Phys. A **26**, L1007(1993).
- [7] J. Hubbard, Proc. R. Soc London Ser. A **276**, 238(1963); algumas generalizações podem ser encontradas em: S. A .Cannas, F. A. Tamarit and C. Tsallis, Solid State Commun. **78**, 685(1991); Phys. Rev. B **45**, 10496(1992); S. Cannas and C. Tsallis, Z. Phys. **89**, 195(1992).
- [8] A. M. C. de Souza, *Study of the electronic structure in fullerenes*, preprint (1996).

- [9] A. M. C. de Souza, *Phys. Rev. B* **51**, 1315(1995).
- [10] L. C. Q. Vilar and A. M. C. de Souza, *Physica A* **84**, 211(1994); A. M. C. de Souza and C. Tsallis, *Dynamics of files*, em redação.
- [11] C. Tsallis, F. Tamarit and A. M. C. de Souza, *Phys. Rev. E* **48**, 1554(1993).
- [12] C. Anteneodo and A. M. C. de Souza, *J. Phys. A*, **29** 6151(1996).
- [13] A. M. C. de Souza and C. Anteneodo, *Biophys. J.* **69**, 1708(1995).
- [14] C. K. Peng, S. V. Buldyrev, A. L. Goldberg, S. Havlin, F. Sciortino, M. Simons and H. E. Stanley, *Nature* **356**, 168(1992).
- [15] C. Tsallis, A. M. C. de Souza and E. M. F. Curado, *Chaos, Solitons and Fractals*, **6**, 561(1995).
- [16] A. Einstein, *Ann. Phys.* **17**, 549(1905), **33**, 1275(1910), and "Investigations on the Theory of Brownian Movement" (Methuen and Co, London, 1926).
- [17] C. Tsallis, S. V. F. Levy, A. M. C. de Souza, and R. Maynard, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3589(1995); errata, a ser publicada.
- [18] C. Tsallis, A. M. C. de Souza and R. Maynard, *Derivation of Lévy-type anomalous superdiffusion from generalized Statistical mechanics, in Lévy flights and related topics in Physics*, eds. M. F. Shlesinger, G. M. Zaslavsky and U. Frisch (Springer, Berlin, 1995), p. 269.

- [19] T. Moriya, *Electron correlation and magnetism in narrow-band systems* (Spring-Verlag, Berlin, 1981).
- [20] C. P. Enz, *A course on many-body theory applied to solid-state physics* (World Scientific, 1992).
- [21] P. Langevin, *J. Phys. (France)* **4**, 678 (1905).
- [22] P. Weiss, *J. Phys. (France)* **6**, 661(1907).
- [23] W. Heisenberg, *Z. Phys.* **49**, 619(1928).
- [24] E. Ising, *Z. Phys.* **31**, 253(1925).
- [25] L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117(1944).
- [26] E. C. Stoner, *Proc. Roy. Soc.* **A154**, 656(1936); **A165**, 372(1938).
- [27] J. C. Slater, *Phys. Rev.* **49**, 537, 931(1936).
- [28] F. Bloch, *Z. Phys.* **57**, 545(1929).
- [29] J. H. Van Vleck, *Rev. Modern Phys.* **25**, 220(1953).
- [30] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **124**, 41(1961).
- [31] Y. Nagaoka, *Phys. Rev.* **147**, 392(1966).
- [32] B. S. Shastry, H. R. Krishnamurthy and P. W. Anderson, *Phys. Rev. B* **41**, 2375(1990).

- [33] M. Takahashi. *J. Phys. Soc. Jpn* **51**, 3475(1982).
- [34] P. W. Anderson. *Science* **235**, 1196(1987); F. C. Zhang and T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **37**, 3759(1988).
- [35] C. I. Ivanov, G. Olbrich, H. Barentzen and O. E. Polansky, *Phys. Rev. B* **36**, 8712(1987).
- [36] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl and R. E. Smalley, *Nature* **318**, 162(1985).
- [37] H. W. Krätschmer, L. D. Lamb, K. Fostiropoulos and D. R. Huffman, *Nature* **347**, 354(1990).
- [38] Para obter os últimos artigos sobre fulerenos mande um e-mail com a mensagem 'subscribe' para bucky@sol1.lrsm.upenn.edu.
- [39] A. F. Hebard et al., *Nature* **350**, 600(1990); M. J. Rosseinsky et al., *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2830(1991).
- [40] R. C. Haddon. *Nature* **367**, 214(1994).
- [41] S. Chakravarty, M. P. Gelfand and S. Kivelson, *Science* **254**, 970(1991).
- [42] A. J. Stone and D. J. Wales, *Chemical Phys. Lett.* **128**, 501 (1986); E. Manousakis. *Physical Review B* **44**, 10991(1991); S. Samuel, *Int. J. Mod. Phys. B* **7**, 3877(1993).
- [43] R. T. Scalettar, A. Moreo, E. Dagotto, L. Bergomi, T. Jolicoeur and H. Monien. *Phys. Rev B* **47**, 12316(1993).

- [44] N. Kurita, K. Kobayashi, H. Kumahora, K. Tago, and K. Ozawa, Chem. Phys. Lett. **188**, 181 (1992); Y. Lin, and F. Nori, '*Electronic structure of single- and multiple-shell carbon fullerenes*', preprint 1993.
- [45] D. Coffey and S. A. Trugman, Phys. Rev. Lett. **69**, 176 (1992).
- [46] M. W. Long, and R. Fehrenbair, J. Phys.:Cond. Mat. **2**, 10343 (1990).
- [47] C. Mei, and L. Chen, Z. Phys. B **72**, 429 (1988).
- [48] N. F. Mott, Proc. Phys. Soc. (London) **A62**, 416(1949); *Metal-isolator transitions* (Taylor and Francis, London, 1974).
- [49] F. C. Zhang, M. Ogata, and T. M. Rice, Phys. Rev. Lett. **67**, 3452 (1991).
- [50] U. Bernstein and P. Pincus, Phys. Rev. B **10**, 3626(1974); R. A. T. de Lima and C. Tsallis, Solid State Commun. **40**, 155(1981).
- [51] P.-M. Allemand et al., Science **253**, 301(1991).
- [52] B. John and K. R. Lewis, *Hierarquia Cromossômica*, tradução de A. M. V. Morgante e L. C. G. Simões, Editora da USP, 1979.
- [53] S. V. Buldyrev, A. L. Goldberger, S. Havlin, C. -K. Peng, M. Simons and H. E. Stanley, Phys. Rev. E **47**, 4514-4523 (1993).
- [54] E. C. Uberbacher and R. J. Mural, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **88**, 11261-11265 (1991).

- [55] W. Li and K. Kaneko, *Europhys. Lett.* **17**, 655-660 (1992).
- [56] R. F. Voss, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3805-3808 (1992).
- [57] C. L. Berthelsen, J. A. Glazier and M. H. Skolnick, *Phys. Rev. A* **45**, 8902(1992).
- [58] S. Nee, *Nature* **357**, 450 (1992).
- [59] V. V. Prabhu and J. -M. Claverle, *Nature* **359**, 782 (1992).
- [60] C. A. Chatzidimitriou-Dreismann and D. Larhammar, *Nature* **361**, 212 (1993).
- [61] C. -K. Peng, S. V. Buldyrev, A. L. Goldberger, S. Havlin, M. Simons and H. E. Stanley, *Phys. Rev. E* **47**, 3730-3733 (1993).
- [62] S. M. Ossadnik, S. V. Buldyrev, A. L. Goldberger, S. Havlin, R. N. Mantegna, C. -K. Peng, M. Simons and H. E. Stanley, *Biophys. J.* **67**, 64-70 (1994).
- [63] S. V. Buldyrev, A. L. Goldberger, S. Havlin, R. N. Mantegna, M. E. Matsu, C. -K. Peng, M. Simons and H. E. Stanley, *Phys. Rev. E* **51**, 5084-5091 (1995).
- [64] A. Arneodo, E. Bacry, P. V. Graves and J. F. Muzy, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3293-3296 (1995).
- [65] S. Karlin and V. Brendel, *Science* **259**, 677-680 (1993).
- [66] S. Tavaré and B. W. Giddings, Some statistical aspects of the primary structure of nucleotide sequences. In: *Mathematical Methods for DNA Sequences* (Waterman M.S. ed.) pp. 117-132 (1989). CRC Press, Boca Raton.

- [67] M. Aida and C. Nagata, *Int. J. Quantum Chem.* **29**, 1253-1261 (1986).
- [68] P. K. Ponnuswamy and M. M. Gromiha, *J. Theor. Biol.* **169**, 419-432 (1994).
- [69] F. Sanger, A. R. Coulson, G. F. Hong, D. F. Hill and G. B. Petersen, *J. Mol. Biol.* **162**, 729-773 (1982).
- [70] A. Grosberg, Y. Rabin, S. Havlin and A. Neer, *Europhys. Lett.* **23**, 373-378 (1993).
- [71] M. Boldrin, *The Impact of Chaos on Economic Theory*. Mimeo. Northwestern University, Evanston, IL(1992).
- [72] J. A. Scheinkman and B. LeBaron, Nonlinear Dynamics and Stock Returns, *The Journal of Business* **62**, 311(1989); J. A. Scheinkman, Nonlinearities in Economic Dynamics, *The Economic Journal* **100**, 3 3(Conference 1990); P. Bak, K. Chen, J. A. Scheinkman and M. Woodford, Aggregate Fluctuations from Independent Sectoral Shocks: Self-organized Criticality in a Model of Production and Inventory Dynamics, *National Bureau of Economic Research, Working Paper* 4241(1992).
- [73] P. W. Anderson, K. J. Arrow and D. Pines, "*The economy as an Evolving Complex System*", Addison-Wesley(1988).
- [74] B. B. Mandelbrot, *the Fractal Geometry of Nature*. W. H. Freeman an Company, New York(1983).
- [75] M. J. Feigenbaum, Quantitative Universality for a Class of Nonlinear Transformations, *J. Stat. Phys.* **19**, 25(1978).

- [76] C. Tsallis, A. M. C. de Souza, J. F. de Moraes and E. M. F. Curado, em redação.
- [77] G. Genotte and H. Leland. *American Economic Rev.* **80**, 999 (1990).
- [78] J. M. Keynes. “*The General Theory of Employment Interest and Money*”, MacMillan and Co., London, pp. 172 (1949).
- [79] P. T. Landsberg, *J. Stat. Phys.* **35**, 159(1984).
- [80] L. G. Taff, “*Celestial Mechanics*” (John Wiley and Sons, New York, 1985) pages 437 and 438; W. C. Saslaw, “*Gravitational Physics of Stellar and Galactic Systems*” (Cambridge University Press, Cambridge, 1985), pages 217 and 218; R. Balian, “*From Microphysics to Macrophysics*”, Vol. 1. (Springer-Verlag, Berlin, 1991), page 134; A. M. Salzberg, *J. Math. Phys.* **6**, 158(1965); H. E. Kandrup, *Phys. Rev. A* **40**, 7265(1989); J. Binney and S. Tremaine, “*Galactic Dynamics*” (Princeton University Press, Princeton, 1987), page 268; ; D. Pavon, *Gen. Rel. and Grav.* **19**, 375(1987).
- [81] B. J. Hiley and G. S. Joyce, *Proc. Phys. Soc.* **85**, 493(1965).
- [82] sobre esta discussão podemos citar as palavras de E. W. Montroll and M. F. Shlesinger, *J. Stat. Phys.* **32**, 209(1983): “the wonderful world of clusters and intermittencies and bursts that is associated with Lévy distributions would be hidden from us if we depended on a maximum entropy formalism that employed simple traditional auxiliary conditions”; ver também: B. D. Hughes, M. F. Shlesinger and E. W. Montroll, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **78**, 3287(1981); M. F. Shlesinger and B. D. Hughes, *Physica A* **109**, 597(1981); E. W. Montroll and M. F. Shlesinger,

in *Nonequilibrium Phenomena II: From Stochastic to Hydrodynamics*, Eds. J. L. Lebowitz and E. W. Montroll (North-Holland, Amsterdam, 1984).

- [83] E. M. F. Curado and C. Tsallis, *J. Phys. A* **24**, L69(1991); Corrigenda: *J. Phys. A* **24**, 3187(1991) and **25**, 1019(1992).
- [84] A. M. C. de Souza and C. Tsallis, *Student's t- and r-Distributions: Unified Derivation From an Entropic Variational Principle*, *Physica A*, aceito para publicação (1996).
- [85] A. R. Plastino and A. Plastino, *Phys. Lett. A* **177**, 177(1993).
- [86] A. R. Plastino and A. Plastino, *Physica A* **202**, 438(1994).
- [87] D. A. Stariolo, *Phys. Lett. A* **185**, 262(1994).
- [88] E. F. Sarmiento, *Physica A* **218**, 482(1995).
- [89] A. M. Mariz, *Phys. Lett. A* **165**, 409(1992); J. D. Ramshaw, *Phys. Lett. A* **175**, 169 and 171(1993).
- [90] A. Chame and E. V. L. de Mello, *J. Phys. A* **27**, 3663(1994).
- [91] A. Chame and E. V. L. de Mello, *The Onsager reciprocity relations within Tsallis statistics*, preprint (1995); M. O. Caceres, *Physica A* **218**, 471 (1995).
- [92] A. K. Rajagopal, *Physica B* **212**, 309(1995).
- [93] C. Tsallis, *Phys. Lett. A* **195**, 329 (1994).

- [94] A. R. Plastino and A. Plastino and C. Tsallis, *J. Phys. A* **27**, 5707(1994).
- [95] A. K. Rajagopal, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3469(1996).
- [96] E. P. da Silva, C. Tsallis and E. M. F. Curado, *Physica A* **199**, 137(1993); Erratum: *Physica A* **203**, 160(1994).
- [97] R. F. S. Andrade, *Physica A* **175**, 285(1991) and **203**, 486(1994).
- [98] S. Curilef and C. Tsallis, *Physica A* **215**, 542(1995).
- [99] L. S. Lucena, L. R. da Silva and C. Tsallis, *Phys. Rev E* **51**, 6247(1995).
- [100] N. Ito and C. Tsallis, *N. Cimento D* **11** 907(1989).
- [101] D. Prato, *Phys. Lett. A* **203**, 165(1995); S. Curilef, *Z. Physik B* **100**, 433 (1996).
- [102] S. Curilef, *Phys. Lett. A* **218**, 11(1996).
- [103] A. R. Plastino and A. Plastino, *Phys. Lett. A* **174**, 384(1993); J. J. Aly, in "N-body Problems and Gravitational Dynamics", Proceedings of the Meeting held at Aussois-France (21-25 March 1993), Eds. F. Combes and E. Athanassoula (Publications de l'Observatoire de Paris, 1993), page 19.
- [104] S. Chandrasekhar, *Rev. Mod. Phys.* **15**, 1(1943); see also P. H. Coleman and L. Pietronero, *Phys. Rep.* **213**, 311(1992).
- [105] K. C. Freeman, *Mon. Notes Astron. Soc.* **134**, 15(1966); S. Sridhar and R. Nityananda, *Mon. Notes Astrn. Soc.* **245**, 713(1990); A. J. Kalnajs, *Astrophys. J.* **180**, 1023(1973).

- [106] A. R. Plastino, comunicação privada.
- [107] A. Lavagno, G. Kaniadakis, M. Rego-Monteiro, P. Quarati and C. Tsallis, *Nonextensive thermostistical approach of the peculiar velocity function of galaxy clusters*, preprint (1996) [astro-phy/9607147].
- [108] V. H. Hamity and D. E. Barraco, Phys. Rev. Lett. **76**, 4664 (1996).
- [109] B. M. Boghosian, Phys. Rev. E **53**, 4754 (1996).
- [110] G. Kaniadakis, A. Lavagno, P. Quarati, Phys. Lett. B **369**, 308 (1996).
- [111] J. M. Liu, J. S. De Groot, J. P. Matte, T. W. Johnston, and R. P. Drake, Phys. Rev. Lett. **72**, 2717 (1994).
- [112] C. Tsallis and A. M. C. de Souza, *Nonlinear inverse bremsstrahlung absorption and nonextensive thermostistics*, submetido para publicação (1996).
- [113] D. A. Stariolo and C. Tsallis, Ann. Rev. Comp. Phys. Vol. II, ed. D. Stauffer (World Scientific, Singapore, 1995) p. 343; T. J. P. Penna, Phys. Rev. E **51** 1(1995); Comput. in Phys. **9**, 341(1995).
- [114] K. C. Mundim and C. Tsallis, Int. J. Quantum Chem. **58**, 373 (1996).
- [115] P. T. Landsberg, in "On Self-Organization", Springer Series on Synergetics **61**, 157(1994).
- [116] S. A. Cannas, D. Stariolo and F. Tamarit, Network: Computation in neural sciences **7**, 141 (1996).

- [117] C. Tsallis, *Chaos, Solitons and Fractals*, **6**, 539(1995).
- [118] C. Tsallis, G. Deutcher and R. Maynard, *REBRAPE/Brazilian Journal of Probabilities and Statistics* **10**, 103 (1996).
- [119] A. Araújo and E. Giné, *The Central Limit Theorem for Real and Banach Valued Random Variables*(J. Wiley, New York, 1980), chapter 2.
- [120] A. Ott, J. P. Bouchaud, D. Langevin and W. Urbach, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2201(1990); J. P. Bouchaud, A. Ott, D. Langevin and W. Urbach, *J. Phys. II France* **1**, 1465(1991).
- [121] B. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature* (Freeman, San Francisco, 1982).
- [122] J. P. Bouchaud and A. Georges, *Phys. Rep.* **195**, 127(1990).
- [123] M. F. Shlesinger, B. J. West and J. Klafter, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1100(1987).
- [124] C. -K. Peng, J. Mietus, J. M. Hausdorff, S. Havlin, H. E. Stanley and A. L. Goldberger, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1343(1993).
- [125] T. H. Solomon, E. R. Weeks and H. L. Swinney, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3975(1993).
- [126] P. A. Alemany and D. H. Zanette, *Phys. Rev. E* **49**, 956(1994).
- [127] S. Wolfram, *MATHEMATICA: A System for doing Mathematics by Computer*, (Adisson-Wesley, Reading, MA, 1992).
- [128] C. Tsallis and S. V. F. Levy, comunicação privada.

- [129] D. H. Zanette and P. A. Alemany, Phys. Rev. Lett. **75**, 366(1995); M. O. Carceres and C. E. Budde, Phys. Rev. Lett **77**, 2589(1996); D. H. Zanette and P. A. Alemany, Phys. Rev. Lett. **77**, 2590(1996).
- [130] C. Tsallis and D. J. Bukman, Phys. Rev. E **54**, R2197(1996).
- [131] G. A. Korn and T. M. Korn, *Mathematical Handbook for Scientists and Engineers*, 2nd ed., (McGraw-Hill, N. York, 1968), p. 683 e 700.

“SISTEMAS ESTATÍSTICOS COMPLEXOS E MECÂNICA ESTATÍSTICA NÃO EXTENSIVA”

ANDRÉ MAURÍCIO CONCEIÇÃO DE SOUZA

Tese de Doutorado apresentada no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, fazendo parte da Banca Examinadora os seguintes professores:

Constantino Tsallis - Presidente

Mario José de Oliveira

Paulo Murilo Castro de Oliveira

Nami Fux Svaiter

Alfredo Miguel Ozorio de Almeida

Rio de Janeiro, 30 de janeiro de 1997