

TESE DE DOUTORADO

MANIFESTAÇÕES DINÂMICAS E
TERMODINÂMICAS DE
SISTEMAS NÃO-EXTENSIVOS

Ernesto Pinheiro Borges

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas
Rio de Janeiro, 2004

MANIFESTACOES DINAMICAS E
TERMODINAMICAS DE SISTEMAS



2004/01

B732

022252

*Aos meus avós Astró e Jacy
e a Tia Zélia*
Exemplos de Trabalho, Amor e Fé

A vós, homens de ciência, a vós técnicos, tenho o dever de lembrar: a ética tem sempre primazia sobre a técnica e o homem sobre as coisas.

Papa João Paulo II, discurso proferido na Praça Dois de Julho (Campo Grande), em Salvador, em 7 de julho de 1980, *in* A Palavra de João Paulo II no Brasil (Edições Paulinas, 1980)

Conhecer alguma coisa cientificamente significa estar-se consciente dos limites do conhecimento e trazer à ciência um espírito filosófico. Sem esse espírito, as proposições e as palavras que expressam os resultados científicos são superstições.

Karl Jaspers, *in* Filosofia da Existência (original de 1938)

Conhecer é não conhecer:
Eis a excelência.
Não conhecer é conhecer:
Eis o erro.

Lao Tse, *in* Tao Te King, §71
(Editorial Estampa, Lisboa 1973)

Mas nós, nós queremos nos tornar aquilo que somos — homens únicos, incomparáveis, aqueles que se dão suas próprias leis, aqueles que criam a si próprios! E para tal é preciso que sejamos daqueles que aprendem e descobrem melhor tudo que é lei e necessidade no mundo; é preciso que sejamos *físicos*, para podermos ser, naquele sentido, criadores (...) Conseqüentemente: viva a física!

Nietzsche, *in* A Gaia Ciência, §335 (original de 1882)

Agradecimentos

Na conclusão de um trabalho longo e significativo do ponto de vista pessoal, é natural, justo e necessário querer partilhar as alegrias e também o mérito das conquistas com os que gostamos e amamos, com os que nos ajudaram, de diversas formas, em diversas ocasiões, para que pudéssemos ter concluído aquilo que há muito nos havíamos proposto.

Apoio, incentivo, compreensão, estímulo, dedicação, cuidado, atenção, gentileza, oportunidade, discussões, paciência, entusiasmo, disponibilidade, exemplo, competência, conhecimento, respeito, admiração, presença, e às vezes mesmo a ausência. Cada um com um conjunto de atributos que tornaram minha vida mais feliz. Muitos lembrados, alguns registrados, outros anônimos. Alguns nem sabem de sua participação e importância. Outros nunca vão sabê-las. Mas eu as sei.

É muito difícil estabelecer uma ordem para enumerá-los; vou escolher a mais simples, a alfabética. Mas não vou me prender rigorosamente a ela. Tentarei colocá-los em classes de universalidade, mesmo sabendo que é vã a tentativa de separá-los. Não há nenhuma ordem de prioridade na aparição dos nomes, exceto os primeiros.

Aos meus pais Iza Conceição e Arnobio, sempre;

A Constantino Tsallis, com o mais eficiente dos métodos pedagógicos — *o exemplo* — e com seu entusiasmo e alegria contagiantes, me iniciou na Gaia Ciencia, e ainda me brindou com sua amizade. Meu respeito e admiração;

Aos meus irmãos Rogério e Denise;

Alexandre, André Massafferri, Augusto, Célia Beatriz, Ervin, Fabricio, Fulvio, Garin, Juan Diaz, Lisa, Luciano da Silva, Luis Moyano, Maurício Braga de Araújo, Nemésio,

Rafael, Raul, Rênio, Roberto Guibert, Silvio Queirós, Ugur, Aytul e Ilkin!, Victor, Viana;

Almério, Luzia, Myriam, Regina, Vanda, o pessoal da Biblioteca e da CAT, do CBPF, e Maísa Sales da UFBA;

Aos professores Alfredo Ozório, Evaldo Curado, Itzhak Roditi, Ivan Oliveira, Lígia Rodrigues, Raimundo Santos, Sebastião Alves Dias;

Alberto Tavares, Álvaro Sousa, Eliana Freire, Lim e Shini, Lia Savastano, Maria José;

Aos professores do Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia, dentre eles Ademir, Arthur, Aurino, Jorge Mário, Kleber, Nelson Andion, Paulo Miranda, pelo apoio e incentivo nos primeiros passos de minha entrada na Física; e ainda na minha adolescência, Adinoel Mota Maia e Padre Ugo Meregalli sj — a este dedico o Capítulo 4;

Aos co-autores (aqueles ainda não listados) Andrea Giansanti, Daniele Moroni, João dos Anjos, José Garcia, Paulo Murilo, Roberto Andrade;

A Pedro Prata, Marcia Marinho, D. Amicy e Nair, por terem me proporcionado a oportunidade do bem morar nesta maravilhosa cidade;

Às mulheres que significativamente têm participado da minha vida.

Elas sabem o quanto. Ou talvez nem imaginem o tanto...

A Christian Beck, Evelyne Kolb, Jonathan P.K. Doye, Mark E.J. Newman, que gentilmente cederam dados de seus trabalhos, a pedido de Constantino; a Jan Naudts, por inestimáveis comentários na Seção 2.3;

Aos membros da Banca Examinadora, Belita Koiller, Itzhak Roditi, Ivan dos Santos Oliveira Júnior, Ívano Damião Soares, Maurício Domingues Coutinho Filho, cujas sugestões, incorporadas à presente Tese, proporcionaram uma melhoria do texto;

Ao CBPF, pelo apoio, alegria e honra de ter participado desta Instituição de Ciências Exatas que traz um ser humano no centro de seu Símbolo;

Ao Departamento de Engenharia Química da Escola Politécnica da Universidade Federal da Bahia, pela minha liberação e apoio; à Fundação Escola Politécnica da Bahia, pelo auxílio financeiro na participação em evento;

À Universidade Federal do Rio de Janeiro, por me permitir cursar uma disciplina em seu Instituto de Física;

A Rômulo Almeida e Anísio Teixeira, dois eminentes baianos, ativos participantes da criação da CAPES: Rômulo seu idealizador, e Anísio seu primeiro Secretário-Geral, Instituição que me concedeu bolsa de estudos;

Certamente existem pessoas que não estão incluídas nesta listagem. Algumas por esquecimento, outras por lembrança, mas todas me ajudaram, cada uma a seu modo.

A todas, meus agradecimentos.

Resumo

Analizamos conexões entre sistemas complexos e a mecânica estatística não-extensiva. Abordamos (i) aspectos matemáticos do formalismo; (ii) sistemas computacionais (mapas de baixa dimensionalidade e sistemas Hamiltonianos de muitos corpos), físicos e sociais, que são razoavelmente bem descritos por este formalismo. Mais especificamente, sempre dentro do formalismo não-extensivo, desenvolvemos generalizações das funções trigonométricas e hiperbólicas, incluindo uma deformação do oscilador harmônico, generalizações da álgebra e do cálculo diferencial, da transformada de Laplace, e aplicações em análise wavelet. Analisamos ainda sistemas dissipativos de baixa dimensionalidade, particularmente dentro da classe de universalidade do mapa logístico, encontrando uma relação de escala de tamanho finito entre o índice entrópico (que caracteriza a generalização não-extensiva) e a granulação (*graining*) adotada. Sistemas conservativos de alta dimensionalidade com interações de longo alcance são também analisados através de dois exemplos computacionais, tratados através de dinâmica molecular. Verificamos a não comutatividade dos limites macroscópico e temporal quando estão presentes interações de longo alcance, limites estes característicos do equilíbrio termodinâmico. A não comutatividade dos referidos limites foi uma conjectura feita por Tsallis; alguns autores já a verificaram, também computacionalmente — nossa contribuição neste caso particular se refere a um exemplo adicional, que corrobora resultados prévios.

Sintetizando, o trabalho se insere na linha de determinar os limites de validade da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs, e a sua possível generalização de acordo com a mecânica estatística não-extensiva.

Abstract

We analyze connections between complex systems and nonextensive statistical mechanics. We deal with (i) mathematical aspects of the formalism; (ii) computational (low-dimensional dissipative systems and many body Hamiltonian systems), physical and social systems, that are fairly well described by this formalism. More specifically, always along the lines of the nonextensive approach, we develop generalizations of trigonometric and hyperbolic functions, including a deformation of the harmonic oscillator, generalizations of the algebra and the differential calculus, of the Laplace transform, and applications in wavelet analysis. We analyze low-dimensional dissipative systems, particularly those within the universality class of the logistic map, finding a finite-size scaling law between the entropic index (that characterizes the nonextensive generalization) and the adopted graining. High-dimensional conservative systems with long-range interactions are also analyzed through two computational examples, treated by molecular dynamics. We verify the non-commutability of macroscopic and temporal limits when long-range interactions are present; these limits are characteristic of thermodynamical equilibrium. The non-commutability of these above-mentioned limits was a previous conjecture by Tsallis; some authors have already computationally verified it — our contribution in this particular case refers to an additional example, which corroborates previous results.

Summarizing, the present work is included along the lines of determining the limits of validity of Boltzmann-Gibbs statistical mechanics, and its possible generalization according to nonextensive statistical mechanics.

Índice

1	Introdução	1
1.1	q -Entropia	3
1.2	Da q -Entropia à mecânica estatística não-extensiva	16
1.3	Um gerador de entropias	21
Parte I - Aspectos Matemáticos		25
2	Funções q-exponenciais e q-logarítmicas	31
2.1	Definições e comportamento geral	32
2.2	Propriedades	36
2.3	q -Álgebra e q -Cálculo	40
2.4	Representações integrais	46
3	q-Transformada de Laplace	48
3.1	Definição da q -transformada de Laplace	48
3.2	Propriedades da q -transformada de Laplace	52
3.3	q -Transformadas de Laplace de algumas funções elementares	64
3.4	Densidade de estados e q -função de partição clássica	72
4	Funções q-trigonométricas e q-hiperbólicas	76
4.1	Funções q -trigonométricas: definições e propriedades	76
4.2	Forma geral da Fórmula de Euler generalizada	84
4.3	Funções q -hiperbólicas	87
5	q-Wavelets	92
5.1	Transformadas de Fourier, Fourier com janelas e wavelets	93
5.2	q -Chapéu mexicano	101
5.3	q -Gaussiana modulada	105
5.4	Wavelets q -trigonométricas	110
Parte II - Sistemas Complexos		114
6	Sistemas dissipativos de baixa dimensionalidade	119
6.1	Mapas dissipativos de baixa dimensionalidade e não-extensividade	121
6.2	Conexões entre as dinâmicas de sensibilidade e relaxação	126

6.3	Outros exemplos indicativos da dependência de q_{rel} da granulação	139
7	Sistemas conservativos de alta dimensionalidade	143
7.1	Violação fraca e forte de Boltzmann-Gibbs	144
7.2	Rotores clássicos anisotrópicos acoplados	150
7.2.1	Modelo	150
7.2.2	Procedimento computacional	154
7.2.3	Resultados	158
7.3	Gases do tipo Lennard-Jones	171
7.3.1	Modelo	171
7.3.2	Resultados	174
8	Outros exemplos de distribuições generalizadas	183
8.1	Leis de Potência e outras distribuições	184
8.2	q -Distribuições emergentes da mecânica estatística não-extensiva	188
8.3	Sistemas físicos	199
8.3.1	Terremotos	199
8.3.2	Material granular	202
8.3.3	Rede topológica em um aglomerado de Lennard-Jones	204
8.3.4	Raios Cósmicos	207
8.4	Sistemas sociais	215
8.4.1	Parcerias sexuais	215
8.4.2	Produto Interno Bruto	216
8.4.3	Distribuições geográficas	221
8.4.4	Colaborações entre cientistas	224
8.4.5	Medida de sucesso entre músicos	225
9	Conclusões	229
A	Integrais q-Gaussianas	236
B	Publicações	238
C	Apresentações	241
	Referências	243

Lista de Figuras

1.1	Distribuição de probabilidades para diferentes valores de q	12
1.2	Probabilidade associada	19
2.1	Função q -exponencial	34
2.2	Função q -logaritmo	35
2.3	Decaimento q -exponencial em gráfico log-log	36
2.4	q -exponencial em gráfico semi- q -logarítmico	37
4.1	Função q -co-seno	79
4.2	Função q -seno	79
4.3	Espiral q -trigonométrica	80
4.4	Função q -tangente hiperbólica	89
5.1	Exemplo de função janela	95
5.2	Diagrama tempo-freqüência	96
5.3	Diagrama tempo-freqüência para transformada com janelas	97
5.4	Dilatações e contrações de uma wavelet	98
5.5	Diagrama tempo-freqüência para transformada wavelet	100
5.6	q -Chapéu mexicano ($\beta = 1/2$)	104
5.7	q -Chapéu mexicano ($\beta = 1/(3 - q)$)	105
5.8	q -Gaussiana modulada	108
5.9	Fator de correção para constante de normalização da q -Gaussiana modulada	109
5.10	Wavelet q -co-seno	111
5.11	Wavelet q -seno	112
5.12	Constante de normalização C_q das wavelets q -trigonométricas	113
5.13	Transformada de Fourier da wavelet q -co-seno	113
6.1	Efeito da escolha da célula inicial	127
6.2	Máximo do pico da entropia em relação à entropia micro-canônica	128
6.3	Evolução temporal da entropia S_1 , caos completamente desenvolvido	129
6.4	Evolução temporal da entropia $S_{q_{sen}}$, limiar do caos	130
6.5	Crescimento da região de decaimento de $S_{q_{rel}}$ com W	131
6.6	Evolução temporal da entropia, delimitando região de relaxação	132
6.7	Evolução temporal do decaimento da entropia $\Delta S_{q_{rel}}$	133
6.8	Oscilações log-periódicas em $\Delta S_{q_{sen}}$	133
6.9	q_{rel} em função da granulação	134

6.10	Coefficiente de correlação linear em função do expoente da lei de escala . . .	135
6.11	$q_{rel}(\infty)$ e q_{sen} em função de z	136
6.12	Coefficiente de correlação para $q_{sen}(z)$ e $q_{rel}(\infty, z)$	136
6.13	Relaxação para o atrator, para o mapa de Hénon	137
6.14	Lei de escala relacionando q_{rel} e q_{sen} para o mapa de Hénon	138
6.15	q_{rel} em função da energia na aniquilação elétron-pósitron	140
6.16	q_{rel} em função de r/η e Re para experimento de Couette-Taylor	141
6.17	q_{rel} em função da granulação para o sistema Hénon-Heiles	142
7.1	Função de escala \tilde{N}	147
7.2	Não-comutatividade dos limites temporal e termodinâmico	149
7.3	Distribuições iniciais de velocidades	156
7.4	Procedimento para avaliação da distribuição de velocidades	157
7.5	Efeito do passo de integração na conservação da energia	157
7.6	Erros relativos médios na conservação da energia	158
7.7	Rotores isotrópicos com interações entre primeiros vizinhos	159
7.8	Rotores anisotrópicos ($L = 1$) com interações entre primeiros vizinhos . . .	160
7.9	Curva calórica de sistemas com interações entre primeiros vizinhos	161
7.10	Evolução temporal de $2\langle K \rangle/N$ para modelo isotrópico de alcance infinito .	162
7.11	Distribuição de probabilidades de velocidades para o modelo isotrópico . .	163
7.12	Evolução temporal de $2\langle K \rangle/N$ para modelo anisotrópico com $L = 1$	164
7.13	Tempos de transição entre regimes meta-estável e estável	165
7.14	Evolução temporal da magnetização para modelo anisotrópico com $L = 1$.	165
7.15	Evolução temporal de $2\langle K \rangle/N$ para $L = 1$, em diferentes energias	166
7.16	Curvas calórica e de magnetização para $L = 1$	166
7.17	Distribuição de probabilidades de velocidades, $L = 1$, $N = 10\,000$	167
7.18	Distribuição de probabilidades de velocidades, $L = 1$, diferentes N	168
7.19	Evolução temporal de $2\langle K \rangle/N$ para $L = 5$	169
7.20	Evolução temporal de $2\langle K \rangle/N$ para $L = 0.2$	169
7.21	Tempos de transição entre regimes meta-estável e estável, $L = 0.2$	170
7.22	Não-suficiência da ordem $\lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty}$ para regime meta-estável	170
7.23	Potencial de Mie, para vários valores do termo atrativo	173
7.24	Posição do poço do potencial de Mie, em função de α	173
7.25	Evolução temporal de $\langle K \rangle/N$, gás com interações de curto alcance	175
7.26	Evolução temporal de $\langle K \rangle/N$, gás com interações de longo alcance	176
7.27	Curva calórica para gases com interações de curto e longo alcance	176
7.28	Espaço de fases mono-particular, região sub-crítica	178
7.29	Espaço de fases mono-particular, região super-crítica	179
7.30	Efeito do número de partículas sobre a curva calórica	180
7.31	Efeito da densidade sobre a curva calórica	181
7.32	Distribuição de velocidades para gases tipo Lennard-Jones	182
8.1	Apologia à Gaussiana	185
8.2	Comparação entre q -distribuições exponenciais esticadas	195

8.3	Comparação entre a distribuição exponencial esticada e a q -exponencial . .	196
8.4	q -exponencial com densidade de estados	197
8.5	Distribuição de terremotos na Califórnia ajustados por uma q -exponencial .	201
8.6	Material granular com deslocamento vertical ascendente constante	204
8.7	Probabilidade acumulada em aglomerados de Lennard-Jones	206
8.8	Distribuição acumulada em aglomerados de Lennard-Jones	207
8.9	Fluxo de raios cósmicos em função da energia	211
8.10	$\langle E \rangle$ dos raios cósmicos em função da energia de corte	212
8.11	$\langle E^2 \rangle$ dos raios cósmicos em função da energia de corte	213
8.12	$\langle E^3 \rangle$ dos raios cósmicos em função da energia de corte	214
8.13	Probabilidade acumulada inversa de diferentes parceiros sexuais	216
8.14	Distribuição acumulada inversa para valor agregado de municípios	219
8.15	Evolução de q nas distribuições de valor agregado de municípios	221
8.16	Distribuição acumulada inversa de PIB/PIB ₀ para 167 países do mundo . .	222
8.17	Distribuição acumulada inversa de áreas dos municípios brasileiros	223
8.18	Distribuição acumulada inversa de preços de terra no Japão	224
8.19	Probabilidade acumulada inversa de número de autores	225
8.20	Distribuição acumulada inversa de músicos mais vendidos na Grã-Bretanha	228

Lista de Tabelas

2.1	Comportamento da função q -exponencial	34
4.1	Casos particulares das funções q -trigonométricas	82
6.1	Parâmetros do mapa z -logístico	139
6.2	Parâmetros do mapa de Hénon	139
8.1	Parâmetros para distribuição acumulada em aglomerados de Lennard-Jones	207
8.2	Parâmetros para distribuições de valor agregado para diferentes países . . .	218
B.1	Publicações	238

Capítulo 1

Introdução

A presente Tese trata de aspectos dinâmicos e termodinâmicos de alguns tipos particulares de sistemas. São aqueles que não são bem descritos (alguns deles não são absolutamente descritos) com o formalismo da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs (BG). Como vamos tratar de termodinâmica, estamos particularmente interessados em sistemas compostos por um número muito grande de partículas elementares. De acordo com o caso analisado, estes constituintes elementares podem ser átomos (ou moléculas), pessoas de uma população, cidades de um país etc.

O formalismo de Boltzmann-Gibbs tem mais de um século de sucesso e é aplicável a um sem-número de sistemas físicos. Mas não todos. Muitos são os sistemas que não se encaixam adequadamente dentro deste quadro. Não se conhece ao certo as razões necessárias e suficientes da não aplicabilidade de BG. Conhecer os limites de sua validade é algo que ainda está por ser completamente elucidado. Mas é certo que esses limites existem. São conhecidas algumas características que levam um dado sistema a extrapolar o contexto da mecânica estatística de BG: interações de longo alcance, memória de longa duração, estrutura fractal ou multifractal de algum espaço de fases pertinente, dinâmica lenta, quebra de ergodicidade, estrutura do tipo *mundo pequeno* (*small world*), sistemas auto-organizados, dentre outras. Mais de uma destas características podem estar presentes simultaneamente.

Falemos brevemente de ordem e caos. Consideremos um retículo com geometria simples e bem definida (p. ex. um retículo triangular, em duas dimensões), no qual cada sítio

representa a posição de um átomo. Os vértices deste retículo representam as ligações entre átomos vizinhos. Trata-se, visivelmente, de um sistema bem ordenado. É possível prever a posição de um átomo distante apenas pela extrapolação da distância interatômica. Consideremos o extremo oposto. Imaginemos que as posições ocupadas pelas moléculas de um gás correspondem aos sítios de um retículo. Essas posições variam no tempo, pois se trata de um sistema dinâmico. Seguramente um sistema caótico. Em ambos os extremos, completa ordem e completo caos a mecânica estatística de BG se aplica bastante bem. A própria origem da mecânica estatística está relacionada a estes sistemas: as distribuições de velocidades de um gás, calculadas por Maxwell, a hipótese do caos molecular de Boltzmann, o cálculo do calor específico de um sólido por Einstein (vide, p. ex., Ref. [1]).

Ocorre que essas duas categorias de sistemas (completamente ordenados ou completamente caóticos) não são as únicas existentes. Na verdade são casos limite. Alguns sistemas apresentam características de ambas (muitos sistemas com comportamentos intermediários entre ordem e caos também são bem descritos pela mecânica estatística de BG). Diríamos mais, deixados por si só, evoluindo de acordo com sua dinâmica própria, estes sistemas alcançam um estado auto-organizado, estado este que costuma estar no limiar entre ordem e caos (*self-organized criticality*, SOC). Para uma abordagem mais abrangente, embora ainda introdutória, vide o livro de Per Bak [2]. Ali o leitor interessado encontrará referências para um posterior aprofundamento. E não são poucos estes casos que vivem na fronteira entre ordem e caos. Tampouco são irrelevantes. Os sistemas vivos são os exemplos mais típicos (eletro-encefalogramas, diversos ritmos biológicos etc.). Mas não apenas. As organizações sociais, econômicas, e também terremotos, materiais granulares, raios cósmicos, dentre outros. Estes são considerados genericamente por *sistemas complexos*.

É interessante que os conceitos de simples e complexo são muito entrelaçados, inclusive do ponto de vista pedagógico. O mapa logístico (trataremos dele no Capítulo 6) é um conhecido sistema dinâmico monoparamétrico, descrito por uma equação do segundo grau, diríamos, pois, uma equação simples. Em condições específicas, este mapa apresenta um

comportamento que deve se caracterizado como complexo. Trata-se, por isso, de um modelo paradigmático para estudos de simplicidade e complexidade, pois contém em si comportamentos ordenados, caóticos e a transição entre estes regimes. Contém em si a essência do caos. A Segunda Parte da presente Tese trata de alguns aspectos destes sistemas complexos.

De uma forma bastante rudimentar¹, poderíamos dizer que a mecânica estatística de BG é aplicável a sistemas simples, enquanto os sistemas complexos necessitam de outra abordagem, mais geral. Que abordagem é esta ainda é um ponto em aberto. Muito provavelmente ela não é única; sistemas complexos podem estar divididos em diferentes classes de universalidade. Uma possível candidata para descrição de pelo menos alguns destes sistemas complexos é a denominada mecânica estatística não-extensiva. A Primeira Parte desta Tese aborda alguns aspectos matemáticos deste formalismo. O restante deste Capítulo introdutório coloca algumas linhas gerais sobre a mecânica estatística não-extensiva; seu texto é parcialmente baseado na Ref. [3].

1.1 q -Entropia

Podemos considerar a formulação do conceito de entropia (juntamente com o de energia e o de simetria) como uma das grandes realizações da ciência. Permitiu formar o corpo teórico da termodinâmica de equilíbrio e de processos irreversíveis, constitui a pedra fundamental da mecânica estatística e também exerce papel central na teoria da informação. Além disso, encontrou terreno fértil em sua interpretação física, permitindo que outras áreas do conhecimento também se beneficiassem, tais como filosofia, economia computação e biologia.

Uma proposta de generalização do conceito de entropia abre terreno para um trabalho gigantesco e muito seria esperado de tal formulação. Será que esta nova entropia serviria de base para a generalização de teorias nas áreas de conhecimento que o conceito usual tem servido? Haveria consistência entre as várias conclusões obtidas em cada uma dessas

¹Utilizamos a palavra *rudimentar* porque os conceitos de simples e complexo não estão definidos. Colocamos apenas exemplos que podem induzir o leitor a uma imagem destes sistemas.

áreas? Quais os pontos que deveriam receber uma formulação geral e quais aqueles que deveriam permanecer intactos? Uma entropia generalizada manteria as interpretações físicas que são atribuídas à entropia usual? Que fenômenos não conseguem ser bem explicados com o formalismo usual? Seriam eles bem descritos com o formalismo generalizado? Que experimentos poderiam testar a validade da(s) nova(s) teoria(s)? A mecânica estatística generalizada manteria seu caráter preditivo, i.e., seria capaz de descrever comportamentos macroscópicos usando *apenas* informações microscópicas? As teorias generalizadas teriam uma estrutura lógica suficientemente simples e seriam esteticamente belas?

São muitas as questões, quase todas ainda abertas, ao menos parcialmente; não temos a pretensão de respondê-las. Nosso objetivo aqui é fornecer ao leitor uma visão introdutória da generalização do conceito de entropia, dentro da mecânica estatística não-extensiva.

Algumas propostas de generalização da entropia foram formuladas dentro do contexto da teoria da informação. Mencionamos a entropia de Rényi [4, 5] em 1960, de Havrda e Charvat [6] em 1967 e a de Daróczy [7] em 1970 (veja a Ref. [8] e outras lá contidas). Mais tarde, em 1988, Tsallis [9] propôs outra generalização, no contexto da mecânica estatística — é desta formulação que vamos tratar aqui. Seguindo a mesma linha de Tsallis, têm surgido outras propostas [10, 11, 12, 13], relacionadas com grupos quânticos ou com o q -cálculo de Jackson² [14, 15].

Nesta Seção vamos ilustrar algumas propriedades da entropia não-extensiva. Uma revisão das propriedades da entropia usual pode ser encontrada em [1, 16, 17, 18] e da entropia não-extensiva em [8, 9, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25]. O sítio da Internet [26] é constantemente atualizado, e dispõe de ampla bibliografia sobre o tema. Em novembro de 2003, p. ex., já constam ali cadastradas mais de 1100 referências relacionadas à mecânica estatística não-extensiva.

Ao generalizar qualquer teoria, é necessário romper com pelo menos um de seus postulados. A escolha adequada de qual (ou quais) postulado(s) deve(m) ser generalizado(s),

²Uma palavra sobre notação. No presente trabalho vamos nos referir inúmeras vezes a generalizações de funções usuais (às vezes também referidas como *deformações*), através de um parâmetro q . Seria, talvez, mais adequado na nossa língua, denominarmos tais generalizações por “cálculo do tipo q ”, “entropia do tipo q ”, e assim por diante. Entretanto, esta forma não é econômica, ou, melhor dizendo, parcimoniosa. Uma opção seria “cálculo q ” etc. Entretanto, vamos adotar, ao longo do trabalho, um anglicismo que expressa a mesma idéia: q -cálculo, q -entropia...

e quais devem ser mantidos, usualmente define o possível sucesso ou fracasso da teoria. Uma proposta que pretenda generalizar o conceito de entropia seguramente deve manter o caráter da irreversibilidade — a segunda lei da termodinâmica. A entropia não-extensiva mantém esta interpretação — isto é verificado através do teorema H, formulado por Boltzmann [27], e sua generalização, por Mariz [28, 29].

A abordagem axiomática da termodinâmica (baseada em postulados) foi formulada nos trabalhos de Caratheódory [30] e Tisza [31]. A versão mais didática dos postulados foi enunciada por Callen [32], que vamos retomar aqui, para fazer a conexão com o formalismo não-extensivo:

Postulado I Existência de *estados de equilíbrio* de sistemas simples³ completamente caracterizados macroscopicamente pela energia interna, volume e número de moles das espécies químicas constituintes.

Postulado II Existência da *entropia* S , função dos parâmetros extensivos de um sistema composto, que é máxima no estado de equilíbrio.

Postulado III A entropia é uma função *contínua, diferenciável e monotonamente crescente* da energia, e é *aditiva* sobre os sub-sistemas constituintes.

Postulado IV A entropia se anula na temperatura de zero absoluto.

A entropia não-extensiva viola a aditividade (parte do terceiro postulado de Callen). Vejamos como isso ocorre. Se considerarmos um sistema composto por dois outros sub-sistemas independentes (A) e (B), o terceiro postulado estabelece que a entropia do sistema composto é dada pela soma das entropias de cada sub-sistema:

$$S^{(A+B)} = S^{(A)} + S^{(B)}. \quad (1.1)$$

Na formulação não-extensiva, um sistema composto apresenta uma q -entropia dada por

$$S_q^{(A+B)} = S_q^{(A)} + S_q^{(B)} + \frac{(1-q)}{k} S_q^{(A)} S_q^{(B)} \quad (1.2)$$

³Sistemas simples são aqueles macroscopicamente homogêneos, isotrópicos, quimicamente inertes, eletricamente descarregados, suficientemente grandes para que se possa desprezar efeitos de superfície e não sujeitos a campos eletromagnético ou gravitacional.

onde q é o índice entrópico que caracteriza a generalização. Notemos que existem duas maneiras de recuperar a extensividade⁴: $q \rightarrow 1$ ou $k \rightarrow \infty$. Isto implica que o índice entrópico q e a constante de Boltzmann podem estar ligadas através de uma relação não trivial. Particularmente a recuperação da extensividade através de $k \rightarrow \infty$ se assemelha ao limite $c \rightarrow \infty$, quando a relatividade restrita recupera a mecânica Newtoniana, como também o limite $1/\hbar \rightarrow \infty$ faz a mecânica quântica recuperar a mecânica de Newton. Dito ainda de outra maneira, em temperaturas infinitas, todos os sistemas se tornam extensivos. A partir de agora, dentro deste formalismo não-extensivo, a entropia usual é simbolizada por S_1 . De um modo geral, o índice inferior $_1$ simboliza as variáveis usuais da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs (que tradicionalmente não carregam índice algum). $(1-q)$ dá a medida da não-extensividade (também referida como não-aditividade): se $q < 1$, o sistema é super-aditivo ($S_q^{(A+B)} > S_1^{(A+B)}$) e se $q > 1$, o sistema é sub-aditivo ($S_q^{(A+B)} < S_1^{(A+B)}$).

A violação da aditividade representa o rompimento com um conceito muito básico na termodinâmica — o de *sistema isolado*. Um sistema isolado é aquele que não troca matéria nem energia nem informação com suas vizinhanças. Sendo o sistema composto $(A+B)$ formado pela união dos sub-sistemas independentes (A) e (B) , o termo $S_1^{(A)}$ da Equação (1.1) representa a entropia do sistema (A) antes de ser posto em contato com o sub-sistema (B) — portanto o sistema (A) isolado; similarmente para $S_1^{(B)}$. Quando postos em contato para formar o sistema composto, cada sub-sistema contribui com sua parte. Na Equação (1.2), é como se na formação do sistema $(A+B)$, o sub-sistema (A) contribuisse com $S_q^{(A)}[1 + \frac{1}{2} \frac{(1-q)}{k} S_q^{(B)}]$, e o sistema (B) contribuisse com $S_q^{(B)}[1 + \frac{1}{2} \frac{(1-q)}{k} S_q^{(A)}]$. Isso significa que é como se antes do sistema composto ser formado, os sub-sistemas já sentiam um ao outro, e não eram, portanto, isolados.

O conceito de sistema isolado é, em todo rigor, uma idealização, entretanto é possível ser bem aproximado quando suas partes interagem apenas se estiverem relativamente próximas (interações de curto alcance, que decaem rapidamente com a distância, veja Ref. [32, p. 330]). Separar esses sistemas (seja por afastamento espacial, seja pela in-

⁴ Esta observação foi feita por Constantino Tsallis.

trodução entre eles de uma parede impermeável às interações que eles trocam) torna as interações tão pequenas que podem ser desprezadas, e assim eles se aproximam de sistemas isolados. Existem, entretanto, interações de *longo alcance* (que decaem lentamente com a distância) e também interações que não são blindadas por paredes físicas. Tais interações são significativas por mais distante que um sistema esteja do outro e não podem ser desprezadas. São exemplos de interações de longo alcance as gravitacionais e as devido a cargas elétricas não blindadas (forças de Coulomb). A não-aditividade da entropia não-extensiva expressa a impossibilidade de se separar completamente (isolar) sistemas interagentes.

Vamos focalizar agora o problema do ponto de vista da mecânica estatística, cujo papel é fazer a ponte entre propriedades microscópicas e propriedades macroscópicas. Nesta passagem, há uma drástica redução no número de graus de liberdade. O papel da estatística é fornecer uma espécie de receita⁵ para o modo pelo qual esta redução de graus de liberdade mecânicos é realizada. A forma mais simples de relacionar uma propriedade macroscópica (a entropia) com uma informação microscópica foi proposta por Boltzmann, para um sistema com energia, volume e número de partículas constantes. Se o espaço de fases deste sistema macroscópico isolado for constituído por W possíveis estados microscópicos, sua entropia fica dada por

$$S_1 = k_B \ln W, \quad (1.3)$$

onde k_B é uma constante positiva que define a unidade em que a entropia é medida (constante de Boltzmann). É desta relação que vem a interpretação da entropia como uma medida de *desordem* de um sistema. Quando queremos pôr ordem em casa, dizemos: “Cada coisa em seu lugar” — existe apenas um local para guardar cada objeto e, de acordo com a equação (1.3), $S_1(W = 1) = 0$. A casa desordenada segue o lema “Qualquer coisa em qualquer lugar”! Quanto maior o número de estados acessíveis, maior a desordem, maior a entropia.

⁵A palavra *receita* está sendo utilizada aqui em sentido laico. Evidente que há uma teoria para a mecânica estatística muito bem estabelecida. Apenas para citar uma referência clássica e fundamental, vide [33].

A forma mais geral da entropia de Boltzmann-Gibbs é dada pelo funcional

$$S_1[\{p_i\}] = -k_B \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i, \quad (1.4)$$

onde p_i é a probabilidade do sistema estar no microestado i . p_i é igual à fração de tempo que o sistema permanece no estado i , durante sua viagem no espaço de fases. A receita da estatística de Boltzmann-Gibbs é a seguinte: as propriedades macroscópicas são médias das propriedades microscópicas ponderadas pelas probabilidades p_i .

Os valores assumidos por p_i em princípio variam de acordo com o estado i . O que define o modo como estes valores se distribuem no espaço de fases são as condições macroscópicas às quais o sistema está submetido (seu estado macroscópico). O caso particular em que os valores de p_i são independentes do estado i (estados igualmente prováveis) ocorre quando são mantidas constantes a energia, o volume e o número de partículas (condições de validade da Equação (1.3)). Este conjunto de estados é denominado *ensemble microcanônico*. Se substituirmos $p_i = 1/W$ (equiprobabilidade) em (1.4), obtemos a Equação (1.3).

Analisemos agora um outro caso, o *ensemble canônico*, no qual a energia não é mais mantida constante. São permitidas flutuações da energia em torno de um valor médio — este valor médio é que é mantido constante. Macroscopicamente isto equivale a manter a temperatura constante. O espaço de fases não mais terá estados equiprováveis. O sistema passará mais tempo nos estados de menor energia (estados com probabilidades maiores) e passará relativamente pouco tempo nos estados de alta energia (estados pouco prováveis). De acordo com a mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs, a distribuição de probabilidades no equilíbrio térmico será dada por

$$p_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z_1}, \quad (1.5)$$

onde E_i é a energia do estado i , β é o parâmetro de Lagrange, identificado como o inverso da temperatura absoluta, $\beta = 1/k_B T$. Z_1 é a função de partição, um fator que garante a normalização das probabilidades ($\sum_{i=1}^W p_i = 1$):

$$Z_1 = \sum_{i=1}^W e^{-\beta E_i} \quad (1.6)$$

p_i é denominado fator (ou peso) de Boltzmann. O valor médio da energia, $\langle E \rangle_1$, é uma propriedade macroscópica (usualmente representada por U , aqui por U_1) denominada energia interna. No formalismo de Boltzmann-Gibbs, a energia interna U_1 é dada por

$$U_1 \equiv \langle E \rangle_1 = \sum_{i=1}^W p_i E_i. \quad (1.7)$$

A mecânica estatística não-extensiva postula que a q -entropia S_q é relacionada com as probabilidades p_i dos microestados por [9]

$$S_q[\{p_i\}] = k \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i^q}{q - 1}. \quad (1.8)$$

Se tomarmos o caso particular $q = 1$, a Equação (1.8) se reduz à entropia de Boltzmann-Gibbs (1.4) (de um modo mais geral, $q = 1$ recupera todo o formalismo usual da mecânica estatística). Como toda abordagem axiomática, a validade dos postulados é verificada pelas conclusões a que eles levam. Assim, vamos investigar alguns resultados conseqüentes da Definição (1.8).

A primeira observação é que S_q é não-negativa, para qualquer valor de q , e esta é uma característica importante. Se considerarmos um sistema composto ($A + B$) no qual os espaços de fase dos sub-sistemas sejam estatisticamente independentes ($p_{ij}^{(A+B)} = p_i^{(A)} p_j^{(B)}$), obtemos como resultado a Equação (1.2), que dá o caráter não extensivo de S_q . Outra propriedade importante é a concavidade. A entropia de Boltzmann-Gibbs é côncava, o que implica que a Equação (1.4) é uma função que apresenta um e só um máximo. Esta é a propriedade que leva a satisfazer a segunda lei da termodinâmica (e também o segundo postulado de Callen) e garante a estabilidade dos sistemas. A entropia generalizada S_q é sempre côncava (exibe um único ponto de máximo) para $q > 0$ e sempre convexa (exibe um único ponto de mínimo) para $q < 0$. Dessa forma, S_q satisfaz a segunda lei da termodinâmica, que deveria ser reescrita como: “A entropia de um sistema isolado em equilíbrio é um extremo”. Se $q > 0$, esse extremo é um máximo e aqui está incluído o caso usual $q = 1$. Se $q < 0$, o extremo é um mínimo. Ter um único extremo é uma característica importante do formalismo não-extensivo. Este parece ser um daqueles pontos que devem permanecer intactos, no processo de generalização da mecânica estatística. Nas palavras de Tisza [31, p. 121],

“From the phenomenological point of view, the entropy maximum principle (...) is so thoroughly corroborated by experiment that we are confident in interpreting any deviation in an actual case as an indication of incomplete thermodynamic equilibrium.”

Se analisarmos o ensemble microcanônico, no qual todos os estados acessíveis são equiprováveis ($p_i = 1/W$), a Equação (1.8) dá

$$S_q[1/W] = k \frac{W^{1-q} - 1}{1 - q}. \quad (1.9)$$

Por esta expressão, S_q é monotonamente crescente com W para todo q , e satura (i.e., aproxima-se assintoticamente de um valor limite) para $q > 1$ (A Figura 2.2, p. 35, ilustra estes comportamentos). Além disso, esta Equação representa o valor máximo (mínimo) da Equação (1.8) para $q > 0$ ($q < 0$). De modo análogo, a Equação (1.3) é o máximo valor possível para a Equação (1.4). Isso permite manter a interpretação de entropia como uma medida da desordem do sistema ($S_q[W = 1] = 0, \forall q$).

No ensemble canônico não-extensivo, a energia pode flutuar em torno do valor esperado generalizado $\langle E \rangle_q$, definido por

$$U_q \equiv \langle E \rangle_q \equiv \sum_{i=1}^W p_i^q E_i. \quad (1.10)$$

Estamos usando aqui, por simplicidade, o vínculo como aparece na Ref. [19], escrito sem levar em conta a normalização. Voltaremos a tratar da generalização do valor esperado mais adiante (Equação (1.28)), de acordo com o proposto em [34]. Com esta restrição (1.10), juntamente com a normalização das probabilidades, a otimização da entropia não-extensiva origina a seguinte distribuição de probabilidades

$$p_i = \frac{1}{Z_q} [1 - (1 - q)\beta_q E_i]^{-\frac{1}{1-q}}, \quad (1.11)$$

onde Z_q é a função de partição generalizada, que garante a normalização das probabilidades,

$$Z_q = \sum_{i=1}^W [1 - (1 - q)\beta_q E_i]^{-\frac{1}{1-q}}, \quad (1.12)$$

e β_q é o parâmetro de Lagrange associado ao vínculo (1.10). Aqui surge uma diferença fundamental: no formalismo de Boltzmann-Gibbs, a distribuição de probabilidades é dada por uma lei exponencial (Equação (1.5)), enquanto na mecânica estatística não-extensiva, a distribuição obedece assintoticamente a uma lei de potência (Equação (1.11)). Se $q > 1$, a distribuição (1.11) tem um decaimento mais lento do que a função exponencial (com um argumento negativo, como é o caso de (1.5)). Isso faz com que os estados de energia mais elevados sejam visitados mais freqüentemente na estatística não-extensiva do que na estatística de Boltzmann-Gibbs. Se $q < 1$, a situação se inverte e a Equação (1.11) tem decaimento muito mais acentuado do que uma exponencial, ao ponto de apresentar valores negativos (ou imaginários) para a probabilidade, quando

$$\beta_q E_i > \frac{1}{1-q}, \quad (1.13)$$

o que é fisicamente inaceitável. Alguns valores particulares de $q < 1$ (p. ex., $q = 1/2, 3/4, \dots$) apresentam probabilidades crescentes com a energia, quando ocorre (1.13), o que também é fisicamente inaceitável. Para corrigir este problema, Tsallis introduziu um corte (*cut-off*) na distribuição de probabilidades [9], que impõe que $p_i \equiv 0$ sempre que ocorra a condição (1.13). Neste caso ($q < 1$), a distribuição de probabilidades é de suporte compacto, mais uma vez essencialmente diferente da distribuição de Boltzmann-Gibbs. A Figura 1.1 ilustra distribuições para diferentes valores de q . Este corte foi posteriormente justificado matematicamente [35, 36].

Alguns sistemas podem apresentar um espaço de fases com regiões atratoras. Se o estado microscópico do sistema cair numa dessas regiões, não consegue mais sair, a não ser após um tempo sensivelmente longo, violando a ergodicidade usual. Pode acontecer que o padrão de preenchimento do espaço de fases apresente uma estrutura fractal. Como os fractais são relacionados com leis de potência, o fato da mecânica estatística não-extensiva também apresentar leis de potência (ela foi, na verdade, inspirada nos multi-fractais, vide Ref. [9]) sugere a possibilidade deste formalismo generalizado ser capaz de descrever alguns sistemas não-ergódicos.

A expressão para a entropia não-extensiva, Equação (1.8) foi originalmente *postulada* [9]. A posteriori é possível se desenvolver argumentos que justifiquem sua forma funcional.

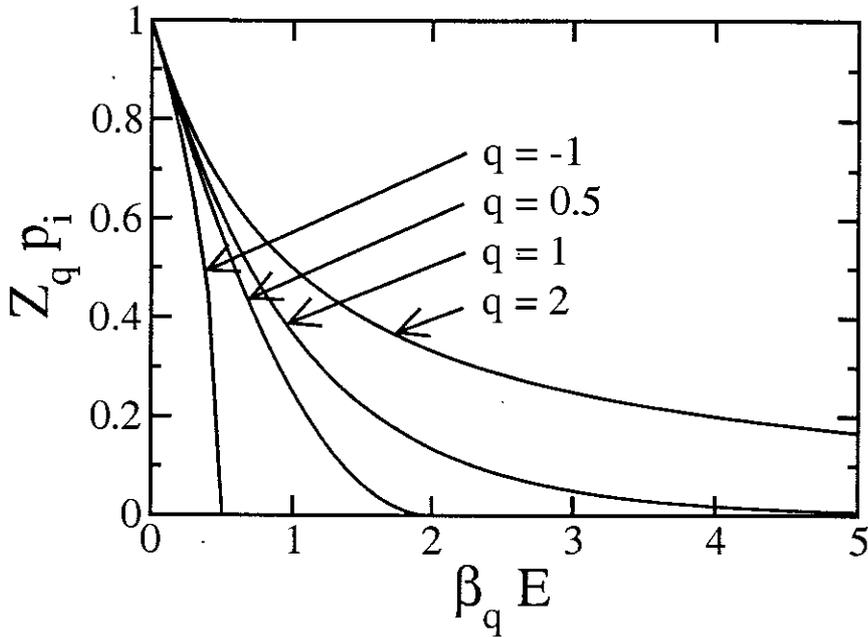


Figura 1.1: Distribuição de probabilidades para diferentes valores de q . Decaimento lento ($q = 2$), exponencial ($q = 1$) e com corte ($q = 0.5$ e $q = -1$).

Assim foi feito, e por mais de um caminho (p. ex., através da forma generalizada do teorema de Shannon [28], ou através da derivada de Jackson [10] — esta última voltaremos a mencionar na Seção 1.3). Aqui vamos mostrar um desses caminhos, desenvolvido e apresentado por Tsallis em algumas palestras, uma delas publicada na Ref. [37]. A idéia geratriz é expressar as probabilidades em termos de potências, p_i^q , ou seja,

$$S_q = S_q[\{p_i^q\}]. \quad (1.14)$$

Uma propriedade desejável é que a entropia seja invariante por permutações dos eventos, e a maneira mais simples para realizar isto é através de um somatório sobre todas as W possibilidades, portanto

$$S_q = S_q \left[\sum_{i=1}^W p_i^q \right]. \quad (1.15)$$

Mais uma vez, buscando o caminho mais parcimonioso, a entropia S_q pode ser expressa

por uma função do primeiro grau na forma

$$S_q = A + B \sum_{i=1}^W p_i^q. \quad (1.16)$$

As constantes A e B devem satisfazer critérios essenciais para uma entropia. O primeiro deles é que a condição de certeza seja mantida, i.e., se um estado específico j tiver ocorrência certa ($p_j = 1, p_{i \neq j} = 0$), a entropia deve ser nula. Isto resulta que $A + B = 0$, e com isso,

$$S_q = A \left(1 - \sum_{i=1}^W p_i^q \right). \quad (1.17)$$

Finalmente, é exigido que esta nova forma funcional seja uma generalização da entropia de Boltzmann-Gibbs, e não uma alternativa a ela. Ou seja, a Equação (1.4) deve ser recuperada em um limite específico, no caso $q \rightarrow 1$. Isto resulta em $A \propto 1/(q - 1)$. Nada obriga que a constante de dimensionalidade seja a própria constante de Boltzmann, k_B — poderia ser também ela uma função de q , devidamente recuperada quando $q \rightarrow 1$. Então, por uma questão de generalidade, em vez de k_B , usa-se escrever k (este ainda é um ponto em aberto no formalismo não-extensivo, vide comentários que se seguem à nota ao pé da página 6). Com isso, a Equação (1.8) é obtida.

Comentamos que a Equação (1.2), responsável pela denominação *não-extensiva*, é válida apenas para sistemas estatisticamente independentes, i.e., $p_{ij}^{(A+B)} = p_i^{(A)} p_j^{(B)}$. Mas ela foi generalizada por Abe [38] para sistemas A e B quaisquer. Usando a expressão para entropia condicional

$$S_q[B|A] = \frac{S_q[A + B] - S_q[A]}{1 + \frac{(1-q)}{k} S_q[A]} \quad (1.18)$$

sendo $S_q[B|A] = S_q[\{p_{ij}^{(B|A)}\}]$, e $p_{ij}^{(B|A)}$ a probabilidade condicional do estado j no sistema B ocorrer, uma vez ocorrido o estado i no sistema A ,

$$p_{ij}^{(B|A)} = \frac{p_{ij}^{(A+B)}}{p_i^{(A)}}, \quad (1.19)$$

Abe chegou às expressões

$$S_q(A + B) = S_q(A) + S_q(B|A) + \frac{(1-q)}{k} S_q(A) S_q(B|A), \quad (1.20)$$

e, simetricamente,

$$S_q(A + B) = S_q(B) + S_q(A|B) + \frac{(1-q)}{k} S_q(B) S_q(A|B). \quad (1.21)$$

A Equação (1.2) é um caso particular destas anteriores, e este resultado é particularmente importante, pois a característica da não-extensividade é mantida mesmo para sistemas interagentes.

É possível restabelecer a extensividade, mesmo para sistemas interagentes, não-extensivos [39]. Consideremos, p. ex., um sistema com estados equiprováveis em que o número de possibilidades cresça com o número de elementos N de acordo com

$$W \sim a\mu^N \quad (1.22)$$

($a > 0$, $\mu > 1$ e $N \rightarrow \infty$). É o caso típico de elementos não interagentes coletivamente: cada elemento apresenta individualmente μ possibilidades. Acrescentar um elemento a mais no sistema tem um efeito multiplicativo sobre W , conforme a Eq. (1.22). Então $S_1 \propto \ln W \propto N$, portanto um sistema extensivo, perfeitamente descrito dentro da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs.

Imaginemos outro sistema, também com estados equiprováveis, mas com partículas coletivamente interagentes. Em conseqüência de alguma característica particular deste sistema, a adição de uma nova partícula que, individualmente, apresenta μ possibilidades, não acrescenta essas possibilidades ao conjunto de forma multiplicativa, mas sim como

$$W \sim bN^\nu \quad (1.23)$$

($b > 0$, $\nu > 0$ e $N \rightarrow \infty$; ν não necessita ser igual a μ). Então, para $q < 1$,

$$S_q = \frac{W^{1-q} - 1}{1-q} \sim \frac{W^{1-q}}{1-q} \sim \frac{b^{1-q}}{1-q} N^{\nu(1-q)} \quad (1.24)$$

O valor especial $q^* = 1 - 1/\nu$ implica $S_{q^*} \propto N$, recuperando assim, mais uma vez, a extensividade.

Comentamos anteriormente a respeito de outras formas entrópicas que generalizam a de Boltzmann-Gibbs. Vamos explicitar aqui a entropia de Rényi [4, 5], em função de sua grande aplicação em fractais e multi-fractais (vide, p. ex., [40])

$$S_q^R \equiv k \frac{\ln \sum_{i=1}^W p_i^q}{1 - q}. \quad (1.25)$$

Ela está relacionada com a entropia não-extensiva por

$$S_q^R = \frac{\ln \left[1 + \frac{(1-q)}{k} S_q \right]}{\frac{(1-q)}{k}}. \quad (1.26)$$

A entropia de Rényi não satisfaz plenamente um dos requisitos básicos esperados pela mecânica estatística: ela não tem concavidade definida para um valor arbitrário de q . Já a entropia não-extensiva é sempre côncava para $q > 0$, e sempre convexa para $q < 0$. Em outras palavras, a entropia de Rényi viola o Postulado II de Callen, descrito anteriormente, enquanto a entropia não-extensiva viola o Postulado III. Ao que tudo indica, o Postulado II, que define a concavidade, permite a adoção dos métodos variacionais, está relacionada com a estabilidade dos sistemas, é muito mais fundamental que o Postulado III, da aditividade. Este último é acidental. Esta também é a opinião de Laszlo Tisza [31, p. 123]:

“The situation is different for the additivity postulate (...), the validity of which cannot be inferred from general principles. We have to require that the interaction energy between thermodynamic systems be negligible. This assumption is closely related to the homogeneity postulate (...). From the molecular point of view, additivity and homogeneity can be expected to be reasonable approximations for systems containing many particles, provided that the intramolecular forces have a short range character.”

Assim, para se fazer uma mecânica estatística, uma descrição da natureza, a entropia S_q^R não parece ser a mais indicada.

Na Seção 1.3 vamos tratar de outra possível forma entrópica que generaliza Boltzmann-Gibbs, desta vez por outro motivo: nós participamos do desenvolvimento desta generalização.

1.2 Da q -Entropia à mecânica estatística não-extensiva

O conceito de entropia é muito fértil e permite diversas possíveis interpretações (vide, p. ex., [41]). Tipicamente a entropia é associada a uma medida do grau de irreversibilidade de um processo, visão ligada à 2ª lei da termodinâmica. Também é tida como uma medida do grau de *desordem* de um sistema, visão característica da mecânica estatística. Ainda, pode ser considerada como uma medida da *desinformação* que se tem a respeito de um determinado sistema; usando uma citação de Brillouin [42], a entropia é uma medida do grau de incerteza que existe antes que uma escolha seja feita. Esta última é a visão da teoria da informação.

Para fazermos mecânica estatística, é preciso estabelecer uma ponte entre o microscópico, as distribuições de probabilidade, e o macroscópico, entropia termodinâmica, calor, trabalho. O procedimento usual da mecânica estatística [1] se baseia no princípio de extremo — maximizar a entropia, sujeita a vínculos impostos pelas interações entre o sistema e suas vizinhanças. Na Seção 1.1 anterior, comentamos brevemente do ensemble microcanônico, correspondente a um sistema fechado, cujo único vínculo que deve respeitar é a normalização das probabilidades. O procedimento de otimização de Lagrange leva às Equações (1.3) ou (1.9), caso se use a entropia de Boltzmann-Gibbs (1.4) ou a entropia não-extensiva (1.8). Comentamos também sobre o ensemble canônico, sistema aberto a trocas de energia sob a forma de calor e trabalho, no qual a energia total não é constante, mas flutua em torno de uma média, associada à temperatura das vizinhanças, que funcionam como um reservatório de calor, impondo um vínculo adicional. No formalismo de Boltzmann-Gibbs, este vínculo é dado pela Equação (1.7).

Já no formalismo não-extensivo, este vínculo também foi generalizado. Não vamos

entrar no mérito das razões históricas das mudanças, mas apenas registrá-las. No artigo original [9], fora adotado o vínculo usual, Equação (1.7). No trabalho de Curado e Tsallis, de 1991, [19], onde foi feita uma interpretação termodinâmica mais aprofundada da entropia não-extensiva, foi percebido que seria mais adequado generalizar também o vínculo da energia média, sendo ali adotada a Equação (1.10). Este procedimento permite superar divergências no segundo momento de algumas distribuições do tipo leis de potência, i.e., para algumas distribuições (por exemplo a Lorentziana), $\langle x^2 \rangle_1$ diverge, enquanto $\langle x^2 \rangle_q$ é finito (vide, p. ex., [43, 44]). Esta Equação representa uma espécie de generalização do conceito de valor médio.

Ainda mais adiante, em 1998, num trabalho de Tsallis, Mendes e A.R. Plastino, fora percebido que o vínculo (1.10) traz três inconsistências teóricas: (i) a distribuição de probabilidade do ensemble canônico, Equação (1.11), não é invariante por translação do espectro de energia, como o é o fator de Boltzmann, Equação (1.5); (ii) o q -valor esperado de uma constante *não* é igual à própria constante ($\langle \lambda \rangle_q \neq \lambda$, $\lambda \in \mathbb{R}$) e (iii) a primeira lei da termodinâmica, que expressa a conservação da energia, não respeita a aditividade, num sistema composto por sub-sistemas independentes, mas uma forma pouco usual [45]

$$U_q^{(A+B)} = U_q^{(A)} + U_q^{(B)} + \frac{(1-q)}{k} [U_q^{(A)} S_q^{(B)} + U_q^{(B)} S_q^{(A)}]. \quad (1.27)$$

Fora proposta então uma generalização adicional do vínculo que um sistema canônico deve estar submetido:

$$\bar{U}_q \equiv \langle \langle E \rangle \rangle_q \equiv \sum_{i=1}^W P_i^{(q)} E_i, \quad (1.28)$$

onde $P_i^{(q)}$ é a probabilidade associada (*escort probability*), definida por [40]

$$P_i^{(q)} = \frac{p_i^q}{\sum_{j=1}^W p_j^q}. \quad (1.29)$$

A sua relação dual é [22]

$$p_i = \frac{[P_i^{(q)}]^{1/q}}{\sum_{j=1}^W [P_j^{(q)}]^{1/q}}. \quad (1.30)$$

As probabilidades associadas obedecem a

$$\sum_{i=1}^W P_i^{(q)} = 1, \quad (1.31)$$

enquanto (vide Eq. (1.37))

$$\sum_{i=1}^W p_i^q \neq 1 \quad (1.32)$$

(exceto para o caso particular $q = 1$). Naturalmente $\sum_{i=1}^W p_i = 1$. A adoção de (1.28) corrige os três problemas citados. Particularmente a energia média associada (\bar{U}_q) de um sistema composto fica aditiva:

$$\bar{U}_q^{(A+B)} = \bar{U}_q^{(A)} + \bar{U}_q^{(B)}. \quad (1.33)$$

O ensemble canônico agora é aquele cuja energia flutua em torno do valor $\langle\langle E \rangle\rangle_q \equiv \bar{U}_q$, que é mantido constante⁶. As três espécies de valor esperado são relacionadas por

$$\langle\langle E \rangle\rangle_q = \frac{\langle E \rangle_q}{\langle 1 \rangle_q} = \langle E \rangle_1 \quad (1.34)$$

(estamos utilizando o valor esperado para a energia E , mas, evidentemente, estas equações são aplicáveis para qualquer observável O). O estágio atual do desenvolvimento da mecânica estatística não-extensiva utiliza a versão de valor médio com as probabilidades associadas, embora ainda não se tenha desenvolvido uma prova de que é realmente esta, ou outra, a forma adequada a ser utilizada.

A Figura 1.2 apresenta a probabilidade associada em função da probabilidade usual, para um sistema com dois possíveis estados ($W = 2$), para $q > 0$ e $q < 0$. Para $q > 0$ as

⁶ É interessante observar que a ciência é um processo de construção, com acertos, erros, desvios e tudo que caracteriza as atividades humanas. Embora possa parecer confuso, é muito gratificante vivenciar este processo, e o aprendizado científico de quem o experimenta se dá de forma seguramente muito diferente daquele baseado em estudos de livros didáticos que versam sobre temas há muito estabelecidos, nos quais se tem a impressão que o conhecimento já surgiu pronto, completo, descontextualizado de um processo histórico e impessoal. Este último caminho estimula a certeza, enquanto o primeiro, no qual se vivencia uma construção, estimula a dúvida. Segundo Feynman, em seu ensaio "The Value of Science", [46, Cap. 6], "Of all its many values, the greatest must be the freedom to doubt".

distribuições associadas são funções monótonas das probabilidades, sempre. Para $q < 0$, isto é verdade para $W = 2$, mas não temos discutido o caso genérico. Da Fig. 1.2(a), fica evidente que $0 < q < 1$ privilegia eventos *raros*, enquanto $q > 1$ privilegia eventos *frequentes*. O valor $q = 1$ é imparcial. Esta característica contém o cerne da generalização da mecânica estatística, de acordo com [34]. Particularmente para $q = 0$, a transformação (1.29) leva qualquer distribuição de probabilidades $\{p_i\}_i^W$ para a distribuição equiprovável $P_i^{(0)} = 1/W$ (Fig. 1.2(b)).

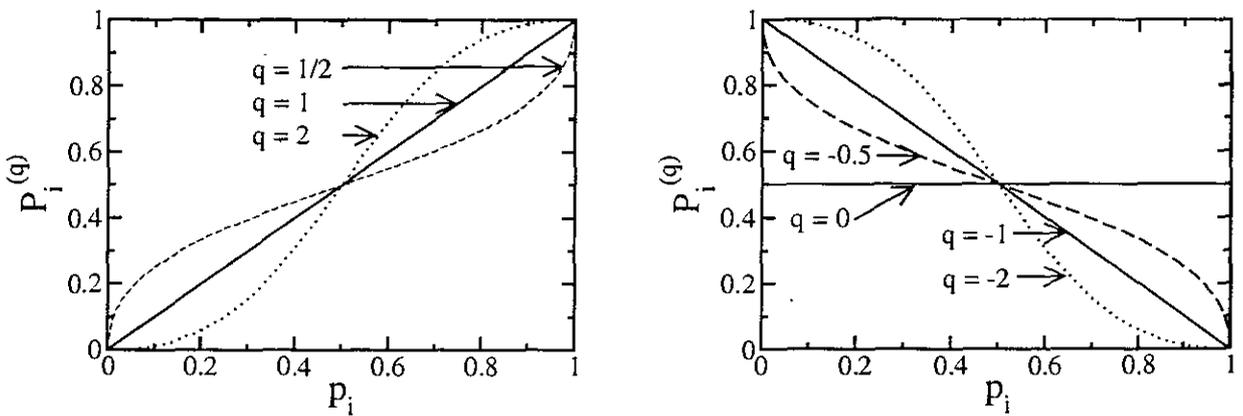


Figura 1.2: Probabilidade associada $P_i^{(q)}$ versus probabilidade p_i para um sistema com duas possibilidades, $W = 2$. (a) $q > 0$: $q = 1$ (linha cheia); $q = 1/2$ (linha tracejada) e $q = 2$ (linha pontilhada); (b) $q \leq 0$: $q = 0$ (linha cheia), $q = -0.5$ (tracejada), $q = -1$ (cheia) e $q = -2$ (pontilhada).

Vamos denominar $\bar{\beta}_q$ o parâmetro de Lagrange associado ao vínculo normalizado, Eq. (1.28), para distinguí-lo de β_q , este último associado ao vínculo não normalizado, Eq. (1.10). O processo de otimização leva à seguinte distribuição de probabilidades *implícita*:

$$p_i = \frac{\left[1 - (1 - q)\bar{\beta}_q \frac{(E_i - \bar{U}_q)}{\sum_{j=1}^W p_j^q} \right]^{\frac{1}{1-q}}}{\bar{Z}_q} \quad (1.35)$$

com \bar{Z}_q a função de partição associada, dada por

$$\bar{Z}_q(\bar{\beta}_q) = \sum_{i=1}^W \left[1 - (1 - q)\bar{\beta}_q \frac{(E_i - \bar{U}_q)}{\sum_{j=1}^W p_j^q} \right]^{\frac{1}{1-q}} \quad (1.36)$$

A distribuição (1.35) é ainda assintoticamente uma lei de potência, e isso mantém as características essenciais da mecânica estatística não-extensiva. Temos que (vide [34])

$$\sum_{i=1}^W p_i^q = \bar{Z}_q^{1-q}. \quad (1.37)$$

Uma observação importante [34, 22] é a forma que as equações anteriores podem ser simplificadas: fatorando ambos numerador e denominador da Equação (1.35) pela quantidade

$$\left[1 + (1-q)\bar{\beta}_q \bar{U}_q / \sum_{j=1}^W p_j^q \right],$$

as Equações (1.35) e (1.36) ficam assim re-escritas:

$$p_i = \frac{[1 - (1-q)\beta'_q E_i]^{\frac{1}{1-q}}}{Z'_q} \quad (1.38)$$

e

$$Z'_q \equiv \sum_{j=1}^W [1 - (1-q)\beta'_q E_j]^{\frac{1}{1-q}}, \quad (1.39)$$

com

$$\beta'_q = \frac{\bar{\beta}_q}{\sum_{j=1}^W p_j^q + (1-q)\bar{\beta}_q \bar{U}_q}, \quad (1.40)$$

sendo β'_q uma função crescente com $\bar{\beta}_q$.

Toda a estrutura de transformadas de Legendre, que representam o coração da termodinâmica, é preservada dentro do formalismo não-extensivo, seja com o uso do vínculo (1.10) ou (1.28). Isto já havia sido percebido em [19]. P. ex., são válidas as seguintes relações (escritas usando \bar{U}_q [34], mas existem também equivalentes para U_q). com

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S_q}{\partial \bar{U}_q}, \quad (1.41)$$

$$\bar{U}_q = \frac{\partial}{\partial \beta_q} (\bar{\beta}_q \bar{F}_q), \quad (1.42)$$

$$\bar{F}_q = \bar{U}_q - T S_q. \quad (1.43)$$

Conexões entre o parâmetro de Lagrange $\bar{\beta}_q$, a temperatura e a energia cinética por partícula ainda não estão completamente elucidadas, e estão sob estudo, p. ex., Ref. [47]. Na Ref. [48] foi demonstrado que a estrutura de transformada de Legendre não depende da forma funcional da entropia.

1.3 Um gerador de entropias

Nos caminhos que esboçamos anteriormente, uma forma funcional para a entropia é *postulada*. Os mecanismos que levam um autor a postular esta ou aquela forma são por demais subjetivos, com boas doses de intuição. Sumiyoshi Abe propôs um método para *gerar* formas entrópicas [10]. Inicialmente consideremos a função

$$g(\alpha) \equiv \sum_{i=1}^W p_i^\alpha, \quad (1.44)$$

com um parâmetro mudo α , satisfazendo a condição de normalização $g(1) = 1$. Abe observou que a entropia de Boltzmann-Gibbs pode ser re-escrita na forma

$$\begin{aligned} S_1 &= -k_B \left. \frac{d g(\alpha)}{d \alpha} \right|_{\alpha=1} \\ &= -k_B \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i. \end{aligned} \quad (1.45)$$

Esta relação é bastante interessante: a derivada usual é relacionada com translações, i.e., avalia o quanto é sensível uma dada função $f(x)$ a pequenas translações em sua variável independente:

$$\frac{df}{dx} \equiv \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}. \quad (1.46)$$

Jackson, em 1909 [14, 15], desenvolveu uma generalização do conceito de derivada, baseado em dilatações na variável independente, i.e., em vez da variável independente x ser transladada por uma pequena quantidade Δx , ela é dilatada por uma pequena quantidade qx (q próximo à unidade):

$$\frac{d_q f(x)}{d_q x} \equiv \frac{f(qx) - f(x)}{(q-1)x} \quad (q \in \mathbb{R}). \quad (1.47)$$

No limite $q \rightarrow 1$, a derivada usual, Equação (1.46), é recuperada.

Abe observou que o mesmo esquema dado pela Equação (1.45) para gerar a entropia de Boltzmann-Gibbs poderia ser usado para gerar a entropia não-extensiva, trocando a derivada Newtoniana pela derivada de Jackson:

$$\begin{aligned} S_q &= -k \left. \frac{d_q g(\alpha)}{d_q \alpha} \right|_{\alpha=1} \\ &= k \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i^q}{q-1}. \end{aligned} \quad (1.48)$$

Seguindo a mesma linha de raciocínio, Abe aplicou uma variante da derivada de Jackson, que é a derivada simétrica,

$$\frac{d_q^S f(x)}{d_q^S x} \equiv \frac{f(qx) - f(q^{-1}x)}{(q - q^{-1})x}, \quad (1.49)$$

obtendo uma nova forma entrópica,

$$\begin{aligned} S_q^S &= -k \left. \frac{d_q^S g(\alpha)}{d_q^S \alpha} \right|_{\alpha=1} \\ &= k \sum_{i=1}^W \frac{p_i^{q^{-1}} - p_i^q}{q - q^{-1}}. \end{aligned} \quad (1.50)$$

Esta entropia tem simetria $q \leftrightarrow q^{-1}$, que é muito importante em grupos quânticos [49, 50]. Aliás, o que chamou a atenção de Abe para o tema foi justamente a ligação entre a mecânica estatística não-extensiva e grupos quânticos, percebida pouco antes por Tsallis [45].

Nós seguimos o mesmo caminho, e utilizamos a derivada de Chakrabarti e Jagannathan [51],

$$\frac{d_{q,q'} f(x)}{d_{q,q'} x} = \frac{f(qx) - f(q'x)}{(q - q')x}, \quad (1.51)$$

aplicando-a ao gerador de Abe, obtendo [11]

$$\begin{aligned} S_{q,q'} &= -k \left. \frac{d_{q,q'} g(\alpha)}{d_{q,q'} \alpha} \right|_{\alpha=1} \\ &= k \sum_{i=1}^W \frac{p_i^{q'} - p_i^q}{q - q'}. \end{aligned} \quad (1.52)$$

A derivada de Chakrabarti e Jagannathan é uma generalização da derivada de Jackson (com $q' = 1$), da derivada simétrica (com $q' = q^{-1}$) e da derivada de McAnally [52] ($q \rightarrow q^{1-\lambda}$, $q' \rightarrow q^{-\lambda}$, onde q and λ são os parâmetros da formulação de McAnally). Conseqüentemente, a (q, q') -entropia também é uma generalização das entropias de Abe, não-extensiva e de Boltzmann-Gibbs. Notemos que a Equação (1.51) apresenta a simetria $q \leftrightarrow q'$, e assim, também, a (q, q') -entropia. Particularmente temos $S_{q,1} = S_{1,q} = S_q$.

Esta entropia bi-paramétrica pode ser expressa em termos da entropia não-extensiva, através da relação

$$S_{q,q'} = \frac{(1 - q')S_{q'} - (1 - q)S_q}{q - q'}. \quad (1.53)$$

Recentemente [53] Giorgio Kaniadakis, de Torino, nos alertou para uma forma entrópica muito similar à $S_{q,q'}$ que já havia sido publicada, dentro do contexto da teoria de informação [54, Eq. (4.2)]. O mesmo ocorreu com a entropia S_q , nos trabalhos de Havrda e Charvat, em 1967 [6], e também de Daroczy, em 1970 [7].

A seguir, apresentamos algumas propriedades da (q, q') -entropia:

(i) Positividade. $S_{q,q'} \geq 0, \forall q, q'$. No caso de certeza ($p_i = 1, p_{j \neq i} = 0$), $S_{q,q'} = 0$, para ambos $q > 0$ e $q' > 0$.

(ii) Expansibilidade. Se adicionarmos eventos com probabilidades nulas (eventos impossíveis), a entropia permanece invariante, para ambos $q > 0$ e $q' > 0$.

(iii) Não-aditividade. Se considerarmos um sistema composto por dois outros subsistemas independentes A e B , com probabilidades fatorizadas $\{p_{i,A}\}$ e $\{p_{j,B}\}$ é possível expressar a entropia do sistema composto através das seguintes formas (doravante consideramos, por simplicidade, $k \equiv 1$):

$$S_{q,q'}^{(A+B)} = S_{q,q'}^{(A)} + S_{q,q'}^{(B)} + \frac{(1-q')}{k} \left[S_{q,q'}^{(A)} S_{q',1}^{(B)} + S_{q,q'}^{(B)} S_{q',1}^{(A)} \right] + \frac{(q'-q)}{k} S_{q,q'}^{(A)} S_{q,q'}^{(B)} \quad (1.54)$$

e

$$S_{q,q'}^{(A+B)} = S_{q,q'}^{(A)} + S_{q,q'}^{(B)} + \frac{(1-q)}{k} S_{q,q'}^{(A)} S_{q,1}^{(B)} + \frac{(1-q')}{k} S_{q,q'}^{(B)} S_{q',1}^{(A)}. \quad (1.55)$$

Quando fazemos $q' = 1$, estas expressões se reduzem à regra de não aditividade da entropia não-extensiva (Equação (1.2)).

(iv) Equiprobabilidade. No ensemble microcanônico ($p_i = 1/W$, $\forall i$), obtemos

$$S_{q,q'}[1/W] = \frac{W^{1-q} - W^{1-q'}}{(q' - q)}. \quad (1.56)$$

A (q, q') -entropia é monótona crescente com W , $\forall q, q'$, exceto quando ambos $q > 1$ e $q' > 1$, e, conseqüentemente, neste caso, não é possível haver um significado físico para $S_{q,q'}$.

Na Ref. [11] analisamos ainda as propriedades lei de potência, concavidade e teorema H, para a entropia $S_{q,q'}$. Propomos também generalizações bi-paramétricas das funções logaritmo e exponencial, seguindo a mesma linha apresentada no Capítulo 2 para as generalizações mono-paramétricas. Não as apresentaremos na presente Tese, mas o leitor interessado pode facilmente encontrá-las.

Parte I

Aspectos Matemáticos

A análise deformada foi iniciada no final do Século XIX, com os trabalhos de Rogers [55], a respeito de expansões de produtos infinitos, como afirma McAnnaly [52]. Mas seu uso e importância cresceram apenas recentemente, em consequência de relações com grupos quânticos [56], e seu desenvolvimento trouxe a necessidade da generalização de funções especiais, para lidar adequadamente com fenômenos não lineares [57]. O problema da álgebra do q -oscilador [58, 59, 60, 61], p. ex., levou ao desenvolvimento de deformações de muitas funções especiais, em particular as funções exponencial e gama [52, 62], as funções trigonométricas [63], polinômios de Hermite e de Laguerre [56, 64], que são casos particulares de séries q -hipergeométricas. Essas deformações usualmente são parametrizadas por uma variável, normalmente denominada por q . Então se fala de q -exponenciais, q -polinômios de Hermite etc. embora possa haver mais de uma deformação com o mesmo nome, como é o caso que vamos abordar.

Uma das deformações bastante conhecida da exponencial; p. ex., é definida por [52, 65]

$$e_q(x) = \sum_n \frac{x^n}{[n]_q!}$$

com

$$[n]_q! = \prod_{j=1}^n [j]_q,$$

sendo $[j]_q$ o número de Gauss, definido por

$$[j]_q \equiv \frac{q^j - 1}{q - 1}$$

com

$$[0]_q! = 1$$

Nesta Tese vamos explorar uma deformação *diferente* das funções exponenciais, logarítmicas, trigonométricas etc., também denominadas funções q -exponenciais, q -logarítmicas etc. As funções que vamos explorar emergem naturalmente do formalismo não-extensivo, e é o que vamos colocar nas linhas a seguir.

Para introduzir as q -funções associadas à mecânica estatística não-extensiva, vamos usar um caminho baseado no paralelismo entre as mecânicas estatísticas de Boltzmann-Gibbs e não-extensiva. Este caminho foi feito inicialmente em [66]. Retomemos a célebre Equação de Boltzmann para a entropia no ensemble microcanônico, Eq. (1.3),

$$S_1 = k_B \ln W,$$

e a correspondente equação microcanônica no formalismo não-extensivo, Eq. (1.9),

$$S_q[1/W] = k \frac{W^{1-q} - 1}{1 - q}.$$

Vamos *definir* a função q -logaritmo como

$$\ln_q x \equiv \frac{x^{1-q} - 1}{1 - q}.$$

Com isso, a entropia não-extensiva fica re-escrita de forma mais compacta como

$$S_q = k \ln_q W.$$

A função inversa da nossa q -logaritmo, naturalmente e consistentemente, deve ser denominada q -exponencial:

$$\exp_q x = [1 + (1 - q)x]^{1/(1-q)}.$$

Facilmente verificamos que

$$\ln_q(\exp_q x) = \exp_q(\ln_q x) = x.$$

Voltaremos a estas definições mais adiante, com mais detalhes, que aqui estamos omitindo por consisão (Capítulo 2, Equações (2.8) e (2.9)).

A distribuição de probabilidades no ensemble canônico, dentro do formalismo de Boltzmann-Gibbs, é proporcional a uma exponencial, Equação (1.5). Quando observamos a correspondente distribuição não-extensiva (consideremos, por simplicidade, as probabilidades não normalizadas — isto não vai influir no que queremos no momento),

Equação (1.11), e a comparando com a nossa recém-criada q -exponencial, vemos que as probabilidades no formalismo não-extensivo ficam re-escritas como

$$p_i \propto \exp_q(-\beta_q E_i).$$

Temos uma questão de forma que evoca em nossas mentes (pelo menos na mente de alguns dos que têm trabalhado na área) um sentimento de simetria, de beleza, e isto nos faz crer que pode haver (e efetivamente há, como veremos nos capítulos subseqüentes) um fundo de verdade nestas q -funções, que merecem uma atenção mais aprofundada.

Consideremos a forma mais geral da entropia, de acordo com Boltzmann-Gibbs (Eq. (1.4)). Ela pode ser re-escrita de diversas formas:

$$\begin{aligned} S_1 &= -k_B \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i \\ &= -k_B \langle \ln p_i \rangle \\ &= k_B \langle \ln 1/p_i \rangle. \end{aligned}$$

Com nossas definições, juntamente com a definição do q -valor esperado (substituindo a energia E que aparece na Eq. (1.10) por uma variável qualquer), a entropia não-extensiva, Eq. (1.8), pode também ser escrita em várias formas análogas:

$$\begin{aligned} S_q &= k \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i^q}{q - 1} \\ &= k \frac{\sum_{i=1}^W p_i - \sum_{i=1}^W p_i^q}{q - 1} \\ &= k \sum_{i=1}^W p_i^q \frac{p_i^{1-q} - 1}{q - 1} \\ &= -k \langle \ln_q p_i \rangle_q, \end{aligned}$$

ou ainda,

$$\begin{aligned} S_q &= k \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i^q}{q - 1} \\ &= k \frac{\sum_{i=1}^W p_i - \sum_{i=1}^W p_i^q}{q - 1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= k \sum_{i=1}^W p_i \frac{1 - p_i^{q-1}}{q - 1} \\
 &= k \sum_{i=1}^W p_i \frac{1 - (1/p_i)^{1-q}}{q - 1} \\
 &= k \langle \ln_q(1/p_i) \rangle_1.
 \end{aligned}$$

A quantidade $\ln(1/p_i)$ é chamada de *surpresa*, em teoria de informação: quando mais raro o evento ($p_i \rightarrow 0$), maior a surpresa caso ele aconteça. No extremo oposto, um evento de ocorrência certa ($p_i = 1$) não causa surpresa alguma. A versão generalizada da surpresa (q -surpresa) é $\ln_q(1/p_i)$.

Os paralelos não param por aí. O q -valor médio da energia, U_q (Eq. (1.42)) e a q -energia livre (Eq. (1.43)) ficam re-escritos na forma

$$U_q = -\frac{\partial}{\partial \beta_q} \ln_q Z_q$$

e

$$F_q = -\frac{1}{\beta_q} \ln_q Z_q$$

Estas Equações estão escritas considerando os valores esperados não normalizados, mas existem, como já dissemos, versões assemelhadas para as expressões com as probabilidades associadas (*escort*) (vide Ref.s [19, 34]). Pretendemos mostrar a proximidade das expressões entre as duas mecânicas estatísticas, por esta razão não é relevante colocar todas as expressões.

As funções q -logaritmo e q -exponencial não-extensivas, Equações (2.8) e (2.9), foram originalmente definidas e assim denominadas por Tsallis em 1994 [66]. Até onde sabemos, o trabalho seguinte que as utilizou, com esses nomes, foi em 1998 [67]. Seguiram-se outros artigos tratando de suas propriedades (vide referências na Seção 2.1). A comunidade científica as aceitou com tanta naturalidade, que passaram a ser referidas espontaneamente, muitas vezes tratando-as como se fossem conhecidas há muito, sem citações à publicação original. Isto é um sintoma bastante positivo, pois mostra que a idéia ganhou uma importância maior que sua autoria.

Nos capítulos seguintes, vamos explorar algumas propriedades destas funções q -exponenciais e q -logarítmicas (Cap. 2), uma generalização da transformada de Laplace (Cap. 3), a extensão analítica para o domínio complexo, originando as funções q -circulares, e também as funções q -hiperbólicas (Cap. 4), e ainda uma aplicação de algumas destas funções na análise de wavelets (Cap. 5). Os Capítulos 3, 4 e 5 são de certo modo, auto-contidos, com uma relação indireta com o restante do corpo da Tese.

Capítulo 2

Funções q -exponenciais e q -logarítmicas

Nesta Seção vamos apresentar algumas propriedades das funções q -logaritmo e q -exponencial, nos restringindo ao domínio real. Expansão analítica ao domínio complexo será abordada no Capítulo 4. Algumas propriedades aqui apresentadas (e também outras que não incluímos) podem ser encontradas nas referências [67, 68, 69].

Consideremos uma equação diferencial ordinária linear de 1ª ordem não homogênea

$$y' + p(x)y = r(x). \quad (2.1)$$

Multiplicando a equação acima pelo fator de integração $e^{\int p(x)dx}$, ela se transforma em uma diferencial exata, e sua bem conhecida solução geral é dada por (vide, p. ex. [70])

$$y(x) = Ce^{-\int p(x)dx} + e^{-\int p(x)dx} \int r(x)e^{\int p(x)dx} dx. \quad (2.2)$$

O caso particular $p = -1$, $r = 0$ é $y' = y$, tendo como solução a função exponencial. A invariância por derivação é uma das mais significativas propriedades da exponencial, e faz dela uma das mais belas funções analíticas. Algumas equações não lineares podem ser reduzidas à forma linear, Eq. (2.1). Uma delas é a Equação de Bernoulli, nome dado em homenagem a Jakob Bernoulli (1654-1705),

$$y' + p(x)y = g(x)y^q, \quad (2.3)$$

cujo método de resolução foi encontrado por Leibniz (1646-1716) em 1696, segundo [70, 71]. A mudança de variáveis $u(x) = [y(x)]^{1-q}$ a reduz à forma linear

$$u' + (1 - q)p(x)u = (1 - q)g(x), \quad (2.4)$$

tendo, portanto a seguinte solução geral:

$$u(x) = Ce^{-(1-q)\int p(x)dx} + (1 - q)e^{-(1-q)\int p(x)dx} \int g(x)e^{(1-q)\int p(x)dx} dx, \quad (2.5)$$

sendo C uma constante de integração. O caso particular $p = 0$, $g = 1$ corresponde a $y' = y^q$, com a solução

$$y = [C + (1 - q)x]^{1/(1-q)}. \quad (2.6)$$

Impondo a condição de contorno $y(0) = 1$, i.e., impondo que o valor da função $y(x)$ coincida com o valor da exponencial em $x = 0$ (equivalente a considerarmos $y(x)$ uma distribuição acumulada inversa de probabilidades), obtemos a q -exponencial $y(x) = [1 + (1 - q)x]^{1/(1-q)}$ (vide Eq. (2.9)). Esta deve ter sido uma das primeiras aparições (mesmo que indiretamente) da função q -exponencial.

Outro prenúncio da q -exponencial (particularmente $\exp_q 1$) é a própria definição do número e , símbolo em homenagem a Euler (1707–1783) (vide, p. ex., Ref. [72, Eq. 4.1.17], e também [73])

$$e \doteq \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n \quad (n \text{ inteiro}). \quad (2.7)$$

Recentemente esta expressão foi generalizada [74] de modo a obter a q -exponencial utilizando a q -álgebra, apresentada na Seção 2.3.

2.1 Definições e comportamento geral

As q -deformações que estamos tratando são definidas por¹ [66, 67]:

$$\ln_q x \equiv \frac{x^{1-q} - 1}{1 - q} \quad (x \in \mathbb{R}^+, q \in \mathbb{R}), \quad (2.8)$$

¹As notações $\exp_q(x)$, e_q^x e $e_q(x)$ são equivalentes e todas elas aparecem na literatura. Procuramos manter um padrão dentro de uma mesma seção ou capítulo, mas evitamos um padrão único para toda a Tese.

$$\exp_q(x) \equiv e_q^x \equiv e_q(x) \equiv \begin{cases} [1 + (1 - q)x]_+^{\frac{1}{1-q}}, & \text{se } [1 + (1 - q)x] > 0, \\ 0, & \text{se } [1 + (1 - q)x] \leq 0 \end{cases} \quad (x, q \in \mathbb{R}). \quad (2.9)$$

Muitas vezes a função q -exponencial fica escrita numa forma mais compacta como

$$\exp_q(x) = [1 + (1 - q)x]_+^{\frac{1}{1-q}} \quad (2.10)$$

sendo $[A]_+ \equiv \max\{A, 0\}$. A primeira observação é que as funções tradicionais $\ln x$ e e^x (que, com a presente generalização, podem ser notadas por $\ln_1 x$ e e_1^x , ou $\exp_1 x$, ou ainda $e_1(x)$) são casos particulares das funções q -deformadas:

$$\ln_1 x = \lim_{q \rightarrow 1+0} \ln_q x = \lim_{q \rightarrow 1-0} \ln_q x, \quad (2.11)$$

$$\exp_1 x = \lim_{q \rightarrow 1+0} \exp_q x = \lim_{q \rightarrow 1-0} \exp_q x. \quad (2.12)$$

Também é imediato verificar que uma é função inversa da outra:

$$\ln_q(\exp_q x) = \exp_q(\ln_q x) = x. \quad (2.13)$$

Temos ainda que

$$\ln_q 1 = 0, \quad \exp_q 0 = 1 \quad (\forall q). \quad (2.14)$$

A q -exponencial traz em sua definição um corte para $q < 1$, sempre que $x \leq -1/(1 - q)$ (suporte compacto). Este corte garante que sua imagem seja real. Em termos físicos, o corte garante que a probabilidade de ocupação de estados seja uma função decrescente da energia: a probabilidade de ocupação de um estado de energia E é proporcional a $\exp_q(-\beta_q E)$. Se $q = 1/2$, p. ex., e não houvesse o corte, a probabilidade seria crescente com E para $E \geq \frac{1}{(1-q)\beta_q}$, o que é fisicamente inaceitável. Além disso, se não fosse o corte, as probabilidades seriam números imaginários sempre que a potência $1/(1 - q)$ não fosse par e $E > \frac{1}{(1-q)\beta_q}$. Para $q > 1$, $\exp_q x$ diverge em $x = 1/(q - 1)$, e permanece divergente para $x > 1/(q - 1)$. Assim, $\exp_q x$ é uma função monótona crescente entre $-\infty$ e $1/(q - 1)$ para $q > 1$, e entre $-1/(1 - q)$ e ∞ para $q < 1$. A Figura 2.1 ilustra o comportamento de $\exp_q x$ para alguns valores típicos de q .

A rigor não seria necessário ilustrar a função q -logaritmo, pois ela é a função inversa da q -exponencial. Colocamos a Figura 2.2 por clareza e completeza. $\ln_q x$ é uma função monótona crescente para $x > 0$, $\forall q$, e, para $q > 1$, $\ln_q x$ se aproxima assintoticamente de $1/(q - 1)$. Notemos que, para $q = 0$, estas funções são lineares ($\ln_0 x = x - 1$; $\exp_0 x = x + 1$). A Tabela 2.1 apresenta uma maneira alternativa (em relação à Figura 2.1) de

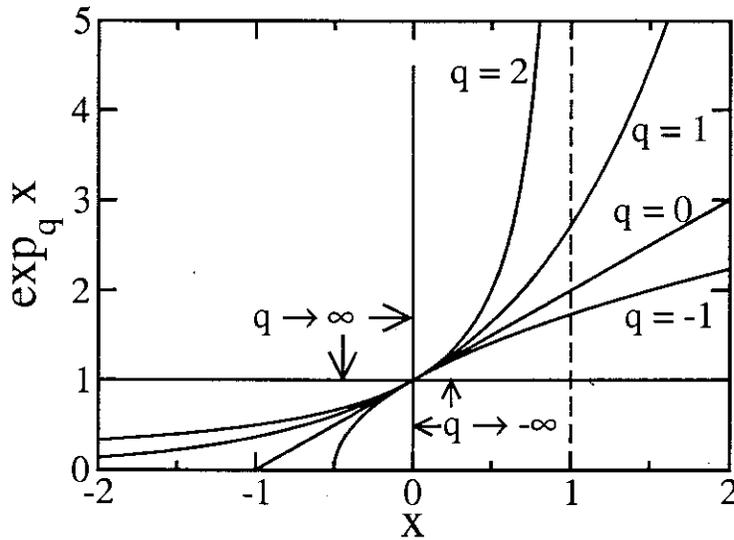


Figura 2.1: Função q -exponencial para valores típicos de q . A linha pontilhada vertical indica a assíntota em $x = 1/(q - 1)$ para $q = 2$.

ilustrar o comportamento da função q -exponencial. Ela considera valores positivos da variável independente x , e mostra separadamente os casos de crescimento e decaimento.

Tabela 2.1: Comportamento da função q -exponencial

$\exp_q(ax)$ $x \geq 0$	$q > 1$	$q < 1$
$a > 0$	Monótona crescente com divergência em $1/[a(q - 1)]$	Monótona crescente sem divergência
$a < 0$	Monótona decrescente sem corte	Monótona decrescente com corte em $1/[a (1 - q)]$

Consideremos uma situação muito frequente, $y(x) = A \exp_q(-\beta_q x)$, com $x > 0$, $\beta_q > 0$ ($a = -\beta_q$ na Tabela 2.1) e $q > 1$. O comportamento assintótico $\sim A[(q - 1)\beta_q x]^{1/(1-q)}$

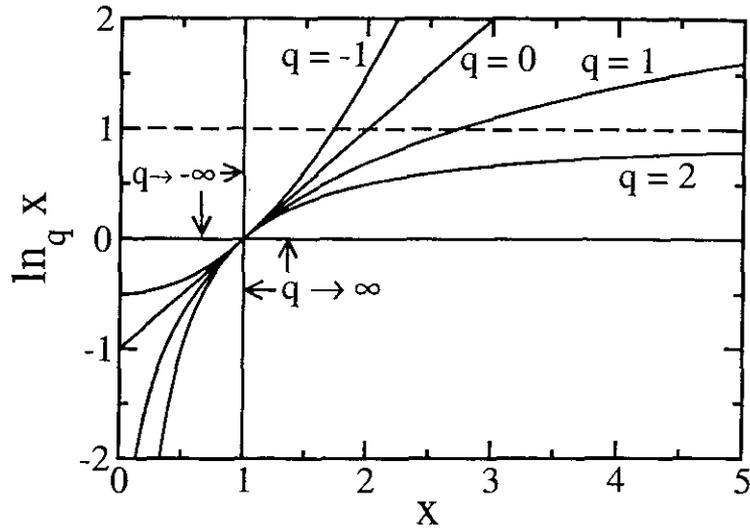


Figura 2.2: Função q -logaritmo para valores típicos de q . A linha pontilhada horizontal indica a assíntota em $x = 1/(q - 1)$ para $q = 2$.

é um decaimento do tipo lei de potência, uma das características mais marcantes da q -exponencial, em contraposição ao decaimento exponencial. A Figura 2.3 ilustra este caso em um gráfico log-log, indicando como identificar visualmente os parâmetros A , β_q e q .

Outra maneira de identificar visualmente uma q -exponencial é através do gráfico em escala semi- q -logarítmica, que é uma generalização do gráfico semi-logarítmico (abscissa linear, ordenada logarítmica). Uma função q -exponencial aparece como uma reta neste gráfico semi- q -log, desde que o valor de q seja o correto. A Figura 2.4 ilustra a mesma função da Figura 2.3 ($y(x)$ na Fig. 2.3 corresponde a x na Fig. 2.4). Quando o valor de q no gráfico semi- q -log é menor que o valor “correto” dos dados (no caso, os dados são representados por $A \exp_q(-\beta_q x)$, com os mesmos parâmetros da Fig. 2.3, i.e., o valor correto de q neste exemplo é 1.5), a curva aparece com uma curvatura positiva; inversamente, quando $q > 1.5$, a curvatura é negativa. Assim é possível identificar o valor de q (aquele que lineariza a curva). A interseção da reta com o eixo $x = 0$ ocorre em $y(0) = \ln_q A$ (se $A = 1$, ocorre em $y(0) = 0$). O valor de β_q pode ser avaliado a partir da inclinação da reta. Se $A = 1$, a inclinação coincide exatamente (em módulo) com β_q . No

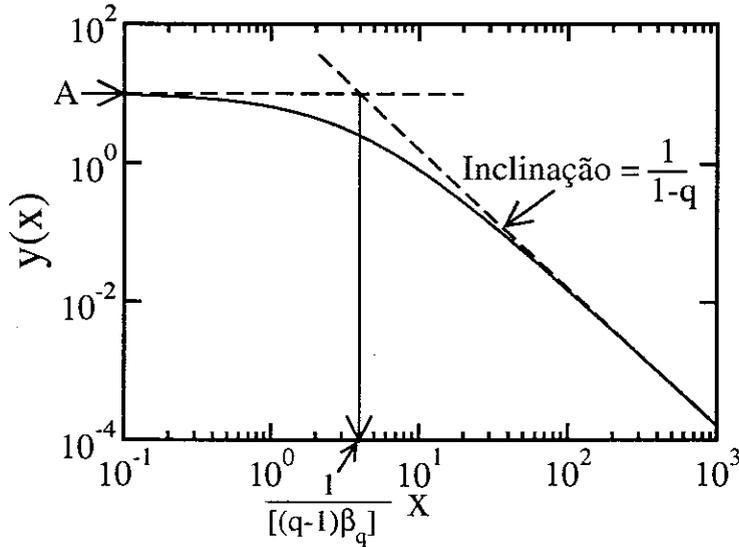


Figura 2.3: Cauda tipo lei de potência da função q -exponencial, representada por $y(x) = A \exp_q(-\beta_q x)$ (linha cheia). $A = 10$, $\beta_q = 0.5$ e $q = 1.5$. A inclinação (negativa) do regime assintótico é dada por $1/(1-q)$. A interseção entre a reta horizontal em $y = A$ e a reta do comportamento assintótico $A[(q-1)\beta_q x]^{1/(1-q)}$ (ambas pontilhadas) ocorre em $x = 1/[(q-1)\beta_q]$.

caso geral, a inclinação I é dada por (vide Equação (2.16))

$$I = -\beta_q(1 + (1-q) \ln_q A). \quad (2.15)$$

2.2 Propriedades

Diversos autores têm apresentado propriedades interessantes das funções q -logaritmo e q -exponencial [66, 67, 75, 35, 36, 68, 69, 76]. A seguir listamos algumas delas. Suas demonstrações são imediatas e não estão incluídas para que o texto não fique desnecessariamente carregado. Naturalmente todas elas se reduzem às expressões usuais no limite $q \rightarrow 1$.

(i) q -Logaritmo de um produto

$$\ln_q(xy) = \ln_q x + \ln_q y + (1-q) \ln_q x \ln_q y. \quad (2.16)$$

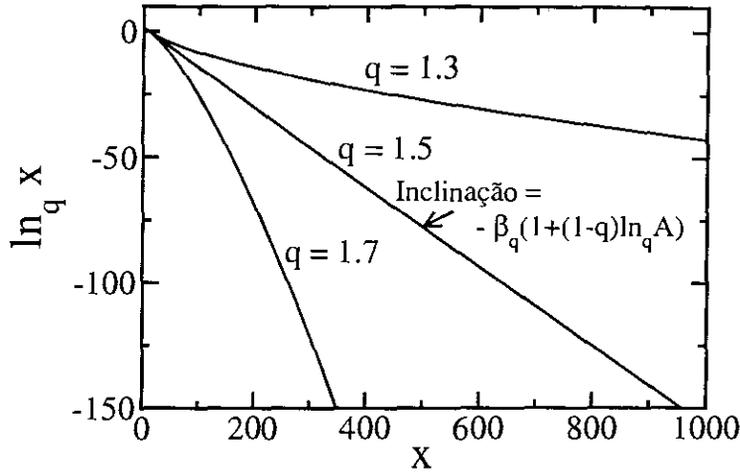


Figura 2.4: q -exponencial em gráfico semi- q -logarítmico. A função representada é $y(x) = A \exp_q(-\beta_q x)$, com $A = 10$, $\beta_q = 0.5$ e $q = 1.5$. A única representação linear ocorre quando os valores de q da função q -exponencial e do gráfico semi- q -log coincidem. Neste exemplo, quando $q < 1.5$, a curva tem curvatura para cima; se $q > 1.5$, a curvatura é para baixo. A interseção da reta ($q = 1.5$) com o eixo $x = 0$ ocorre em $y(0) = \ln_q A$ (neste caso, próximo a zero). A inclinação da reta (com $q = 1.5$) identifica β_q .

(ii) q -Logaritmo de uma razão

$$\ln_q(x/y) = \frac{\ln_q x - \ln_q y}{1 + (1 - q) \ln_q y}. \quad (2.17)$$

Particularmente o q -logaritmo do inverso de um número x não nulo é

$$\ln_q x^{-1} = -\frac{\ln_q x}{1 + (1 - q) \ln_q x} = -\frac{1}{x^{1-q}} \ln_q x. \quad (2.18)$$

(iii) q -Logaritmo de uma potência

$$\ln_q x^a = \frac{a}{1 - q} \ln_{1-a} x^{1-q}. \quad (2.19)$$

(iv) Derivada de um q -logaritmo

$$\frac{d}{dx} \ln_q x = \frac{1}{x^q}. \quad (2.20)$$

(v) Integral de um q -logaritmo

$$\int \ln_q x \, dx = \frac{x \ln_q x - x}{2 - q}. \quad (2.21)$$

Particularmente, a divergência de $\ln_q x$ quando $x \rightarrow 0$ (e $q > 1$) é suficientemente suave, de modo que

$$\int_0^1 \ln_q x = \frac{-1}{2 - q} < \infty. \quad (2.22)$$

A seguir as propriedades equivalentes da q -exponencial:

(i) Produto de q -exponenciais

$$\exp_q(x) \exp_q(\pm y) = \exp_q[x \pm y \pm (1 - q)xy]. \quad (2.23)$$

que é válida se $\exp_q(x)$ e $\exp_q(\pm y)$ diferem de zero e de $+\infty$. A transformação de variáveis $\eta = x$, $\xi = \pm y[1 + (1 - q)x]$ permite que a q exponencial de uma soma possa ser escrita como (usando as variáveis x e y , em vez de η e ξ)

$$\exp_q(x \pm y) = \exp_q(x) \exp_q\left(\frac{\pm y}{1 + (1 - q)x}\right), \quad \forall x \neq \frac{1}{q - 1}. \quad (2.24)$$

Particularmente, a inversa de uma q -exponencial é obtida fazendo $-y \rightarrow -x$ na Eq. (2.24):

$$(\exp_q x)^{-1} = \exp_q\left(\frac{-x}{1 + (1 - q)x}\right), \quad \forall x \neq \frac{1}{q - 1}. \quad (2.25)$$

Outra maneira de expressarmos a q -exponencial de uma soma é

$$[\exp_q(x \pm y)]^{1-q} = [\exp_q(x) \exp_q(\pm y)]^{1-q} \mp (1 - q)^2 xy. \quad (2.26)$$

(ii) Razão entre q -exponenciais

$$\frac{\exp_q x}{\exp_q y} = \exp_q\left(\frac{x - y}{1 + (1 - q)y}\right). \quad (2.27)$$

(iii) Potência de uma q -exponencial

$$(\exp_q x)^a = \exp_{1-(1-q)/a}(ax). \quad (2.28)$$

(iv) Derivada de uma q -exponencial

$$\frac{d}{dx} \exp_q x = (\exp_q x)^q \quad (2.29)$$

Considerando a Eq. (2.28), temos também a forma

$$\frac{d}{dx} \exp_q x = \exp_{2-1/q}(qx). \quad (2.30)$$

De uma forma mais geral, a n -ésima derivada de $\exp_q x$ é dada por:

$$\frac{d^n}{dx^n} \exp_q x = Q_{n-1} \exp_{q_n} \{[1 - n(1 - q)]x\}, \quad (2.31)$$

sendo q_n dado pela fração continuada

$$q_n = 2 - \underbrace{\frac{1}{2 - \frac{1}{2 - \frac{1}{\dots \frac{1}{2 - q}}}}}_{(n-1)\text{vezes}} \quad (2.32)$$

e

$$\begin{aligned} Q_n(q) &= 1 \cdot q \cdot (2q - 1)(3q - 2) \cdots [nq - (n - 1)] \\ &= \prod_{m=0}^n [mq - (m - 1)]. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Temos que $Q_n(1) = 1, \forall n \in \mathbb{N}$.

(v) Integral de uma q -exponencial

$$\int \exp_q(ax) = \frac{1}{(2 - q)a} [\exp_q(ax)]^{2-q}. \quad (2.34)$$

Particularmente, $\exp_q(-x)$ decai suficientemente rápido a zero quando $x \rightarrow \infty$, de modo que

$$\int_0^\infty \exp_q(-x) dx = \frac{1}{2 - q} < \infty. \quad (2.35)$$

2.3 q -Álgebra e q -Cálculo

Nesta Seção apresentamos uma possível deformação da álgebra [77], relacionada às funções q -exponencial e q -logaritmo. Desenvolvemos também uma q -derivada, e consistentemente uma q -integral, para a qual a q -exponencial é auto-função. Esta q -derivada (e q -integral) tem uma natureza dual, que também é evidenciada.

Parte deste trabalho foi desenvolvido simultaneamente e independentemente por pesquisadores da Universidade de Le Mans, França. Sua primeira versão foi tornada pública em 26 de março de 2003 [78], pouco menos de um mês antes do nosso [77] (em 24 de abril de 2003). Tomamos conhecimento disso quando Alexandre Wang, um dos co-autores de [78], nos contactou. O seu trabalho foi finalmente publicado em [79] (nesta versão final é incluída uma citação ao nosso [77], este último aceito para publicação na *Physica A* (2004) (e, naturalmente, citando [78, 79]). A semelhança é muito grande, no que diz respeito a generalização da álgebra. Naquele trabalho, nós também propusemos uma generalização consistente do cálculo (também apresentada na presente Seção), coisa que não consta em [78, 79]. Impressiona constatar quão freqüentes são tais casos na literatura científica.

q -Álgebra

As propriedades (2.16) e (2.23) nos induzem a definir uma generalização da operação soma de dois números x e y :

$$x \oplus_q y \equiv x + y + (1 - q)xy, \quad (2.36)$$

que traz a soma usual como caso particular $\oplus_1 \equiv +$. A q -soma é comutativa

$$x \oplus_q y = y \oplus_q x, \quad (2.37)$$

associativa

$$x \oplus_q (y \oplus_q z) = (x \oplus_q y) \oplus_q z, \quad (2.38)$$

mas não é distributiva em relação à multiplicação usual

$$a(x \oplus_q y) \neq (ax \oplus_q ay) \quad (2.39)$$

pois $ax + ay + (1 - q)axy \neq ax + ay + (1 - q)a^2xy$. O elemento neutro da q -soma é o número zero,

$$x \oplus_q 0 = 0 \oplus_q x = x. \quad (2.40)$$

Podemos definir o oposto (ou inverso aditivo) de x , denominado $\ominus_q x$, como o elemento que, quando q -somado com x , resulta o elemento neutro,

$$x \oplus_q (\ominus_q x) = 0. \quad (2.41)$$

Assim, temos

$$\ominus_q x \equiv \frac{-x}{1 + (1 - q)x} \quad (x \neq 1/(q - 1)). \quad (2.42)$$

Esta definição nos permite definir a q -diferença, como sendo a q -soma com o oposto

$$\begin{aligned} x \ominus_q y &\equiv x \oplus_q (\ominus_q y) \\ &= x - \frac{y}{1 + (1 - q)y} - \frac{(1 - q)xy}{1 + (1 - q)y} \\ &= \frac{x - y}{1 + (1 - q)y} \quad (y \neq 1/(q - 1)). \end{aligned} \quad (2.43)$$

São válidas para a q -diferença as seguintes propriedades:

$$x \ominus_q y = \ominus_q y \oplus_q x \quad (2.44)$$

$$x \ominus_q (y \ominus_q z) = (x \ominus_q y) \oplus_q z. \quad (2.45)$$

Busquemos agora uma generalização da multiplicação tal que, como alternativa às equações (2.16) e (2.23), tenhamos

$$\begin{aligned} \ln_q(x \otimes_q y) &= \ln_q x + \ln_q y, \\ \exp_q x \otimes_q \exp_q y &= \exp_q(x + y). \end{aligned}$$

Isto nos leva à definição do q -produto entre dois números

$$x \otimes_q y \equiv [x^{1-q} + y^{1-q} - 1]_+^{\frac{1}{1-q}} \quad (x, y > 0). \quad (2.46)$$

O q -produto é comutativo ($x \otimes_q y = y \otimes_q x$) e associativo ($x \otimes_q (y \otimes_q z) = (x \otimes_q y) \otimes_q z$), desde que $x \otimes_q y$ e $y \otimes_q z$ difiram de zero e de infinito. É fácil observar que o número um é o elemento neutro do q -produto

$$x \otimes_q 1 = 1 \otimes_q x = x, \quad (2.47)$$

e isto nos permite definir o inverso multiplicativo ($1 \oslash_q x$) por meio de

$$x \otimes_q (1 \oslash_q x) = 1. \quad (2.48)$$

Encontramos

$$1 \oslash_q x \equiv [2 - x^{1-q}]_+^{\frac{1}{1-q}} \quad (x \geq 0). \quad (2.49)$$

A relação $1 \oslash_q (1 \oslash_q x) = 1$ é válida apenas se $0 \leq x^{1-q} \leq 2$. É curioso notar que $1 \oslash_q 0 = 2^{\frac{1}{1-q}}$ não diverge para $q < 1$. A q -razão é definida por

$$x \oslash_q y \equiv [x^{1-q} - y^{1-q} + 1]_+^{\frac{1}{1-q}} \quad (x, y > 0), \quad (2.50)$$

desde que $x^{1-q} \leq 1 + y^{1-q}$, e satisfaz

$$x \oslash_q y = 1 \oslash_q (y \oslash_q x) \quad (x^{1-q} \leq 1 + y^{1-q}), \quad (2.51)$$

$$x \oslash_q (y \oslash_q z) = (x \oslash_q y) \oslash_q z = (x \oslash_q z) \oslash_q y \quad (z^{1-q} - 1 \leq y^{1-q} \leq x^{1-q} + 1). \quad (2.52)$$

Esta q -aritmética permite expressar as propriedades do q -logaritmo e q -exponencial de forma mais compacta:

$$\ln_q(xy) = \ln_q x \oplus_q \ln_q y \quad \exp_q x \exp_q y = \exp_q(x \oplus_q y) \quad (2.53)$$

$$\ln_q(x \otimes_q y) = \ln_q x + \ln_q y \quad \exp_q x \otimes_q \exp_q y = \exp_q(x + y) \quad (2.54)$$

$$\ln_q(x/y) = \ln_q x \ominus_q \ln_q y \quad (\exp_q x)/(\exp_q y) = \exp_q(x \ominus_q y) \quad (2.55)$$

$$\ln_q(x \oslash_q y) = \ln_q x - \ln_q y \quad (\exp_q x) \oslash_q (\exp_q y) = \exp_q(x - y) \quad (2.56)$$

As igualdades são apenas válidas sob certas restrições, conforme indicadas abaixo.

$$\begin{array}{ll}
 x > 0, y > 0 & x \geq_q 0 \text{ or } y \geq_q 0 \\
 x^{1-q} + y^{1-q} \geq 1 & x \geq_q 0 \text{ and } y \geq_q 0 \\
 x > 0, y > 0 & y >_q 0 \\
 x^{1-q} + 1 \geq y^{1-q} & x \geq_q 0 \text{ or } y \geq_q 0
 \end{array} \tag{2.57}$$

Aqui, a notação $x \geq_q 0$ significa $1 + (1 - q)x \geq 0$. Dentre estas relações chamamos atenção para a Equação (2.54), que mostra como q -fatorar as partes cinética e potencial do Hamiltoniano de um sistema (e, em seguida, q -fatorar cada uma dessas partes individualmente).

É direto definir uma q -potência,

$$\begin{aligned}
 x^{\otimes_q^n} &\equiv \underbrace{x \otimes_q x \otimes_q x \otimes_q \cdots \otimes_q x}_{n \text{ vezes}} \\
 &= [nx^{1-q} - (n-1)]_+^{\frac{1}{1-q}} \quad (x > 0, n \in \mathbb{N}),
 \end{aligned} \tag{2.58}$$

com $\otimes_1^n = n$. Também é um cálculo direto a q -soma de n termos idênticos (vide [80, Eq. (7)]):

$$\underbrace{x \oplus_q x \oplus_q x \oplus_q \cdots \oplus_q x}_{n \text{ termos}} = \frac{1}{1-q} \{[1 + (1-q)x]^n - 1\}. \tag{2.59}$$

Esta Equação pode servir de base para a definição de um q -produto diferente, não-comutativo (que poderíamos notar \odot_q): $n \otimes_q x \neq x \odot_q n$, com $1 \odot_q x = x$ e $n \odot_1 x = nx$. Não exploramos esta possibilidade no presente trabalho. Outra possibilidade não desenvolvida, mas muito desejável, é a extensão desta q -álgebra para *operadores matriciais*. Bastante recentemente foram publicados (em forma de *e-prints*), trabalhos utilizando estes conceitos da q -álgebra para vários outros aspectos matemáticos: lei dos erros, fórmula de Stirling e mais genericamente, a estrutura matemática supostamente na qual é embasada a mecânica estatística não-extensiva ([74, 81, 82]).

q -Cálculo

A função exponencial é invariante em relação a derivação, $y' = y$, ou, em outras palavras, e^x é auto-função (ou função própria) do operador derivada. A versão generalizada desta

propriedade é dada pela Eq. (2.29), $y' = y^q$. Cabe, então, a pergunta: Qual o operador para o qual a q -exponencial é auto-função? A resposta pode ser obtida seguindo os passos dos trabalhos de Kaniadakis, Ref. [83, 84]. Nestes trabalhos, foi desenvolvida outra deformação para as funções exponencial e logarítmica (diferente da q -deformação que estamos tratando), denominadas $\exp_{\{\kappa\}}(x)$ e $\ln_{\{\kappa\}}(x)$, respectivamente. A motivação para esta κ -deformação foi a tentativa de buscar funções que satisfizessem a propriedade

$$\exp_{\{\kappa\}}(x) \exp_{\{\kappa\}}(-x) = 1, \quad (2.60)$$

i.e., que preservassem a norma (isto ficará mais claro na Seção 4.1, quando desenvolvermos a generalização do teorema de Pitágoras, Equação (4.16)), encontrando

$$\exp_{\{\kappa\}} \equiv \left(\sqrt{1 + \kappa^2 x^2} + \kappa x \right)^{1/\kappa}. \quad (2.61)$$

A função exponencial usual é recuperada para $\kappa = 0$. No caso das q -deformações que estamos tratando aqui, temos

$$\exp_q(x) \exp_q(-x) = \exp_q[-(1-q)x^2]. \quad (2.62)$$

Não vamos desenvolver as κ -funções, mas seguiremos consistentemente os passos de [83, 84], e assim definimos o operador q -derivada:

$$\begin{aligned} D_{(q)}f(x) &\equiv \lim_{y \rightarrow x} \frac{f(x) - f(y)}{x \ominus_q y} \\ &= [1 + (1-q)x] \frac{df(x)}{dx}. \end{aligned} \quad (2.63)$$

É imediato verificar que a q -exponencial é auto-função de $D_{(q)}$

$$D_{(q)} \exp_q x = \exp_q x. \quad (2.64)$$

Temos a q -integral dada por

$$\int_{(q)} f(x) d_q x = \int \frac{f(x)}{1 + (1-q)x} dx, \quad (2.65)$$

onde

$$\begin{aligned} d_q x &\equiv \lim_{y \rightarrow x} x \ominus_q y \\ &= \frac{1}{1 + (1 - q)x} dx. \end{aligned} \quad (2.66)$$

Naturalmente $\int_{(q)} D_{(q)} f(x) d_q x = D_{(q)} \int_{(q)} f(x) d_q x = f(x)$. As equações (2.63)–(2.66) estão sujeitas à restrição $1 + (1 - q)x \neq 0$.

Associado a $D_{(q)}$, existe um operador dual $D^{(q)}$, definido por

$$\begin{aligned} D^{(q)} f(x) &\equiv \lim_{y \rightarrow x} \frac{f(x) \ominus_q f(y)}{x - y} \\ &= \frac{1}{1 + (1 - q)f(x)} \frac{df(x)}{dx}, \end{aligned} \quad (2.67)$$

e sua correspondente q -integral dual

$$\int^{(q)} f(x) dx \equiv \int [1 + (1 - q)f(x)] f(x) dx. \quad (2.68)$$

Aqui também $\int^{(q)} D^{(q)} f(x) dx = D^{(q)} \int^{(q)} f(x) dx = f(x)$. Similarmente às restrições de $D_{(q)}$ e $\int_{(q)}$, as Equações (2.67) e (2.68) são válidas se $1 + (1 - q)f(x) \neq 0$. Temos

$$D^{(q)} \ln_q x = \frac{1}{x}. \quad (2.69)$$

Obviamente a derivada e a integral usuais são auto-duais. As q -derivadas duais são relacionadas por

$$D^{(q)} f(x) = \frac{1}{[1 + (1 - q)x][1 + (1 - q)f(x)]} D_{(q)} f(x). \quad (2.70)$$

Elas obedecem à regra da cadeia nas formas:

$$D_{(q)}[f(x) g(x)] = D_{(q)}[f(x)] g(x) + f(x) D_{(q)}[g(x)] \quad (2.71)$$

e

$$D^{(q)}[f(x) g(x)] = \frac{1}{[1 + (1 - q)f(x)g(x)]} \times \{ [1 + (1 - q)f(x)] D^{(q)}[f(x)] g(x) + [1 + (1 - q)g(x)] f(x) D^{(q)}[g(x)] \}. \quad (2.72)$$

2.4 Representações integrais

Esta Seção não traz contribuição nossa. Ela está aqui porque as relações abaixo podem ser úteis em uma variedade de situações. A função q -exponencial admite representações integrais, e isso pode ser bastante útil em várias circunstâncias. Elas estão ligadas às representações integrais da função gama (integral de Euler de segunda espécie), $\Gamma(z)$.

Para $q > 1$, utilizamos a definição da função gama (ou melhor, uma pequena variação da definição, vide Ref. [85, Eq.s 8.310 1 e 8.312 2]; a definição usual é dada com $k = 1$ na equação abaixo):

$$\Gamma(z) = k^z \int_0^\infty u^{z-1} e^{-ku} du \quad (\text{Re } z > 0, \text{ Re } k > 0). \quad (2.73)$$

Através da mudança de variáveis $k = [1 - (1 - q)x] > 0$ com $x > 0$, e $z = 1/(q - 1) > 0$, a Eq. (2.73) pode ser re-escrita como

$$\exp_q(-x) = \frac{1}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \int_0^\infty u^{\frac{1}{q-1}-1} e_1^{-u} e_1^{-(q-1)xu} du \quad (q > 1, x > 0). \quad (2.74)$$

Esta expressão apareceu inicialmente em [20], tendo sido então referida como Equação de Hilhorst.

Para $q < 1$, temos (pelo menos) duas maneiras para expressar a q -exponencial. Uma delas apareceu na Ref. [86], e é originada da seguinte representação integral para a função gama (vide Ref.[85, Eq. 8.315 1])

$$\frac{1}{\Gamma(z)} = \frac{i}{2\pi} \int_C (-t)^{-z} e^{-t} dt \quad (z \text{ não inteiro}). \quad (2.75)$$

Identificando $t = ku$ ($k > 0$, $1 - z = 1/(1 - q)$ e $k = [1 - (1 - q)x]$), obtemos

$$\begin{aligned} \exp_q(-x) &= \Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right) \frac{i}{2\pi} \int_C (-u)^{-\left(\frac{2-q}{1-q}\right)} e^{-u} e^{(1-q)xu} du \\ &(q < 1, (2-q)/(1-q) \text{ não inteiro}, 1 - (1-q)x > 0). \end{aligned} \quad (2.76)$$

Outra representação válida para $q < 1$ foi desenvolvida na Ref. [87], e provém da relação para a função gama (vide Ref. [85, Eq. 8.315 2])

$$\begin{aligned} \frac{2\pi e_1^{-ab} b^{z-1}}{\Gamma(z)} &= \int_{-\infty}^\infty du \frac{e_1^{bui}}{(a + iu)^z} \\ &(\text{Re } a > 0, b > 0, \text{ Re } z > 0, |\arg(a + iu)| < \frac{1}{2}\pi). \end{aligned} \quad (2.77)$$

Identificando $b = [1 - (1 - q)x]$, $z - 1 = 1/(1 - q)$, $a = 1$, obtemos

$$\exp_q(-x) = \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right)}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e_1^{1+iu}}{(1+iu)^{\frac{2-q}{1-q}}} e_1^{-(1-q)(1+iu)x} du$$

($q < 1$, $1 - (1 - q)x > 0$). (2.78)

Capítulo 3

q -Transformada de Laplace

Entre as transformadas integrais, a de Laplace ocupa um lugar especial, com inúmeras aplicações em ciência e engenharia, principalmente por causa de sua utilidade na resolução de equações diferenciais de funções de ordem exponencial com condições iniciais ou condições de contorno semi-infinitas. Um uso particular da transformada de Laplace, dentro da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs, é estabelecer a conexão entre a densidade de estados (uma propriedade inteiramente mecânica) com a função de partição canônica. Neste Capítulo vamos explorar uma possível generalização da transformada de Laplace [88], e verificar seu papel nesta conexão entre a densidade de estados e a função de partição canônica da mecânica estatística não-extensiva.

Mencionamos que a transformada de Fourier tem grande semelhança com a de Laplace, e sua generalização foi feita por Tsallis e Prato [89] embora nunca a tenham publicado.

3.1 Definição da q -transformada de Laplace

Para obtermos a generalização da transformada de Laplace de uma função $f(x)$, tradicionalmente dada por

$$\mathcal{L}\{f(t)\}(s) \equiv F(s) \equiv \int_0^{\infty} f(t) \exp_1(-st) dt, \quad (3.1)$$

dentro do formalismo não-extensivo, consideramos a troca da exponencial pela q -exponencial. Podemos fazer isso, de uma forma simples, substituindo o núcleo $\exp_1(-st)$ por uma das seguintes alternativas:

- (i) $\exp_q(-st)$,
- (ii) $[\exp_q(-t)]^s$,
- (iii) $[\exp_q(+t)]^{-s}$.

Todas elas se deduzem ao núcleo usual $\exp_1(-st)$ no limite $q \rightarrow 1$. No presente trabalho, consideramos a segunda possibilidade, e definimos a q -transformada de Laplace de uma função f por

$$\mathcal{L}_q\{f(t)\}(s) \equiv F_q(s) \equiv \int_0^\infty f(t) [\exp_q(-t)]^s dt. \quad (3.2)$$

Em seguida, vamos mostrar que esta generalização particular apresenta várias propriedades interessantes. No final da Seção 3.4 comentamos sobre as duas outras possibilidades (i) e (iii). Nesta seção vamos seguir mais ou menos de perto a Ref. [90].

Inicialmente vamos generalizar o conceito de função de ordem exponencial, através da seguinte definição:

Definição. A função f , definida no intervalo $a \leq t < \infty$, é dita ser de ordem q -exponencial σ_0 ($\sigma_0 \in \mathbb{R}$) se existir $M \in \mathbb{R}$ tal que $|[\exp_q(-t)]^{\sigma_0} f(t)| \leq M$.

Esta definição está dizendo que $f(t)$ não cresce mais rapidamente do que $[\exp_q(-t)]^{\sigma_0}$ (para um dado σ_0), quando $t \rightarrow \infty$.

Coloquemos ainda a seguinte definição:

Definição. Uma função, definida no intervalo infinito $a \leq t < \infty$ é dita contínua por pedaços em (a, ∞) , se para todo intervalo finito $a \leq t \leq b$ a função possui um número finito de descontinuidades tais que, em cada descontinuidade $t = t_0$, os limites $f(t_0 + 0)$ e $f(t_0 - 0)$ existam.

Enunciemos, então, o teorema da existência:

Teorema. Se $f(t)$ é uma função contínua por pedaços para $0 \leq t \leq \infty$ e é de ordem q -exponencial σ_0 , então a integral (3.2) converge para $\text{Re}(s) > \sigma_0 + (q - 1)$.

Para demonstrá-lo, consideremos um caso mais geral onde a variável s possa ser complexa, $s = \sigma + i\omega$. Seja, então, a função $F_{q,R}(s)$, definida por

$$F_{q,R}(s) = \int_0^R |[\exp_q(-t)]^s| |f(t)| dt$$

$$= \int_0^R [1 - (1 - q)t]^{\frac{-\sigma}{q-1}} |f(t)| dt. \quad (3.3)$$

Por $f(t)$ ser contínua por pedaços, admitamos um número finito m de descontinuidades no intervalo $0 \leq t \leq R$, localizadas em t_1, t_2, \dots, t_m , e façamos $t_0 = 0$. Com isso, a função $F_{q,R}(s)$ fica

$$F_{q,R}(s) = \sum_{i=0}^{m-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} [1 - (1 - q)t]^{\frac{-\sigma}{q-1}} |f(t)| dt + \int_{t_m}^R [1 - (1 - q)t]^{\frac{-\sigma}{q-1}} |f(t)| dt. \quad (3.4)$$

Como $f(t)$ é de ordem q -exponencial σ_0 , então

$$\begin{aligned} F_{q,R}(s) &\leq \sum_{i=0}^{m-1} M \int_{t_i}^{t_{i+1}} [1 - (1 - q)t]^{-\frac{\sigma - \sigma_0}{q-1}} dt + M \int_{t_m}^R [1 - (1 - q)t]^{-\frac{\sigma - \sigma_0}{q-1}} dt \\ &\leq \frac{M}{\sigma - \sigma_0 + (1 - q)} \left[1 - [1 - (1 - q)R]^{-\frac{\sigma - \sigma_0}{q-1} + 1} \right] \\ &\leq \frac{M}{\sigma - \sigma_0 + (1 - q)}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

portanto a cota superior não depende de R . O limite $\lim_{R \rightarrow \infty} F_{q,R}(s) = F_q(s) = \mathcal{L}_q\{f(t)\}$ prova a existência da q -transformada.

A q -transformada inversa de Laplace é dada por

$$\mathcal{L}_q^{-1}\{F_q(s)\}(t) = f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} F_q(s) [\exp_q(-t)]^{-s-(1-q)} ds, \quad (3.6)$$

onde c é uma constante real que excede a parte real de todas as singularidades de $F_q(x)$.

A prova é obtida verificando as identidades

$$f(t) = \mathcal{L}_q^{-1}\{\mathcal{L}_q\{f(t)\}\} \quad (3.7)$$

e

$$F_q(s) = \mathcal{L}_q\{\mathcal{L}_q^{-1}\{F_q(s)\}\}. \quad (3.8)$$

A primeira identidade, Equação (3.7), é provada como segue:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}_q^{-1}\{\mathcal{L}_q\{f(t)\}\} &= \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \mathcal{L}_q\{f(t)\} [1 - (1-q)t]^{-\frac{s}{1-q}-1} ds \\
 &= \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \left[\int_0^\infty f(t') [1 - (1-q)t']^{\frac{s}{1-q}} dt' \right] \\
 &\quad \times [1 - (1-q)t]^{-\frac{s}{1-q}-1} ds \\
 &= \int_0^\infty \frac{f(t')}{[1 - (1-q)t]} \\
 &\quad \times \left\{ \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \left[\frac{1 - (1-q)t'}{1 - (1-q)t} \right]^{\frac{s}{1-q}} ds \right\} dt' \\
 &= \int_0^\infty \frac{f(t')}{[1 - (1-q)t]} \\
 &\quad \times \left\{ \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \exp_1 \left(s \ln_1 \left[\frac{1 - (1-q)t'}{1 - (1-q)t} \right]^{\frac{1}{1-q}} \right) ds \right\} dt'. \quad (3.9)
 \end{aligned}$$

Se considerarmos a representação da função delta de Dirac,

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \exp_1(\alpha x) d\alpha \quad (3.10)$$

e também a propriedade da função $f(x)$ com uma única raiz em x_0 ,

$$\delta f(x) = \frac{1}{\left| \frac{df}{dx} \right|_{x=x_0}} \delta(x - x_0), \quad (3.11)$$

encontramos diretamente a Equação (3.7).

Podemos verificar a Equação (3.8) definindo

$$g(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} F_q(z) [\exp_q(-t)]^{-z-(1-q)} dz, \quad (3.12)$$

onde $F_q(s) = \mathcal{L}_q\{g(t)\}$ e c é tal que a integral acima convirja. A q -transformada de Laplace de $g(t)$ é

$$\mathcal{L}_q\{g(t)\} = \frac{1}{2\pi i} \int_0^\infty dt [\exp_q(-t)]^s \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dz F_q(z) [\exp_q(-t)]^{-z-(1-q)}. \quad (3.13)$$

Trocando a ordem das integrais (é requerida convergência uniforme para tal), temos

$$\mathcal{L}_q \{g(t)\} = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dz F_q(z) \int_0^\infty dt [\exp_q(-t)]^{s-z-(1-q)}. \quad (3.14)$$

Requeremos $Re(z) = c < Re(s)$ para que seja garantida a convergência da segunda integral. Encontramos, então,

$$\mathcal{L}_q \{g(t)\} = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dz \frac{F_q(z)}{s-z}. \quad (3.15)$$

Para avaliar esta integral, escolhamos um contorno C_R definido pela linha reta $Re(z) = c$ e um arco à sua direita, tal que o pólo s fique localizado em seu interior. Se $F_q(z)$ não possuir singularidades à direita de $Re(z) = c$, se for de ordem $O(z^{-k})$ (i.e., $|F_q(z)| < M|z|^{-k}$ quando $|z| \rightarrow \infty$, $M, k \in \mathbb{R} > 0$) neste semi-plano, e a integral sobre o arco não der qualquer contribuição, então, pela fórmula integral de Cauchy (ver, p. ex., [90]), encontramos que $g(t)$ e $f(t)$ possuem a mesma q -transformada de Laplace $F_q(s)$.

3.2 Propriedades da q -transformada de Laplace

Nesta Seção demonstramos algumas propriedades da presente q -transformada de Laplace. Após o enunciado de cada propriedade, e antes de sua demonstração, colocamos a versão tradicional ($q = 1$) da propriedade, para comparação.

(i) Valores limite

$$\lim_{s \rightarrow \infty} s \mathcal{L}_q \{f(t)\} = \lim_{t \rightarrow 0} f(t), \quad (3.16)$$

$$\lim_{s \rightarrow 0} s \mathcal{L}_q \{f(t)\} = \lim_{t \rightarrow \infty} \{[1 - (1 - q)t] f(t)\}. \quad (3.17)$$

Para $q = 1$:

$$\lim_{s \rightarrow \infty} s \mathcal{L}_1 \{f(t)\} = \lim_{t \rightarrow 0} f(t),$$

$$\lim_{s \rightarrow 0} s \mathcal{L}_1 \{f(t)\} = \lim_{t \rightarrow \infty} f(t).$$

Demonstração:

$$\mathcal{L}_q \left\{ \frac{d}{dt} [[1 - (1 - q)t]f(t)] \right\} = s\mathcal{L}_q \{f(t)\} - f(0). \quad (3.18)$$

Pelo teorema da existência, $\lim_{s \rightarrow \infty} \mathcal{L}_q \left\{ \frac{d}{dt} [[1 - (1 - q)t]f(t)] \right\} = 0$, o que implica Eq. (3.16).

$$\lim_{s \rightarrow 0} \mathcal{L}_q \left\{ \frac{d}{dt} [[1 - (1 - q)t]f(t)] \right\} = \lim_{s \rightarrow 0} s\mathcal{L}_q \{f(t)\} - f(0). \quad (3.19)$$

Mas

$$\begin{aligned} \lim_{s \rightarrow 0} \mathcal{L}_q \left\{ \frac{d}{dt} [[1 - (1 - q)t]f(t)] \right\} &= \lim_{s \rightarrow 0} \int_0^{\infty} \frac{d}{dt} [[1 - (1 - q)t]f(t)] [1 - (1 - q)t]^{\frac{s}{1-q}} dt \\ &= \int_0^{\infty} dt \frac{d}{dt} [[1 - (1 - q)t]f(t)] \lim_{s \rightarrow 0} [1 - (1 - q)t]^{\frac{s}{1-q}} \\ &= \int_0^{\infty} dt \frac{d}{dt} [[1 - (1 - q)t]f(t)] \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} [[1 - (1 - q)f(t)]] - f(0). \end{aligned} \quad (3.20)$$

Substituindo em (3.19), temos (3.17).

(ii) Linearidade

$$\mathcal{L}_q \{a_1 f_1(t) + a_2 f_2(t)\} = a_1 \mathcal{L}_q \{f_1(t)\} + a_2 \mathcal{L}_q \{f_2(t)\}. \quad (3.21)$$

Para $q = 1$, a expressão é idêntica. A demonstração é trivial.

(iii) Escala

$$\mathcal{L}_q \{f(at)\} = \frac{1}{a} F_{q'}(s/a) \quad \text{com } q' = 1 - (1 - q)/a. \quad (3.22)$$

Para $q = 1$,

$$\mathcal{L}_1 \{f(at)\} = \frac{1}{a} F(s/a).$$

Demonstração:

$$\mathcal{L}_q\{f(at)\} = \int_0^\infty f(at)[1 - (1 - q)t]^{-\frac{s}{1-q}} dt.$$

Fazendo a mudança de variáveis $\lambda = at \Rightarrow d\lambda = a dt$ e $q' = 1 - \frac{1-q}{a}$, temos que

$$\mathcal{L}_q\{f(at)\} = \frac{1}{a} \int_0^\infty f(\lambda)[1 - (1 - q')\lambda]^{-\frac{s}{1-q'}} d\lambda.$$

(iv) Atenuação, ou substituição

$$F_q(s - s_0) = \mathcal{L}_q \left\{ [\exp_q(-t)]^{-s_0} f(t) \right\}. \quad (3.23)$$

Para $q = 1$,

$$F_1(s - s_0) = \mathcal{L}_1 \{ e^{s_0 t} f(t) \}.$$

Demonstração:

$$\begin{aligned} F_q(s - s_0) &= \int_0^\infty f(t)[1 - (1 - q)t]^{-\frac{s-s_0}{1-q}} dt \\ &= \int_0^\infty f(t)[1 - (1 - q)t]^{-\frac{s_0}{1-q}} [1 - (1 - q)t]^{-\frac{s}{1-q}} dt \end{aligned}$$

que é a Eq. (3.23).

(v) q -Deslocamento, ou q -translação

$$\mathcal{L}_q \left\{ f \left(\frac{t - t_0}{1 - (1 - q)t_0} \right) \theta \left(\frac{t - t_0}{1 - (1 - q)t_0} \right) \right\} = [\exp_q(-t_0)]^{s - (1 - q)} F_q(s), \quad (3.24)$$

onde $\theta(t)$ é a função degrau unitário de Heaviside.

Para $q = 1$,

$$\mathcal{L}_1 \{ f(t - t_0) \theta(t - t_0) \} = e^{-s t_0} F_1(s).$$

Demonstração:

Da definição da q -transformada de Laplace, temos

$$\mathcal{L}_q \left\{ f \left(\frac{t-t_0}{1-(1-q)t_0} \right) \theta \left(\frac{t-t_0}{1-(1-q)t_0} \right) \right\} = \int_0^\infty f \left(\frac{t-t_0}{1-(1-q)t_0} \right) \theta \left(\frac{t-t_0}{1-(1-q)t_0} \right) [1-(1-q)t]^{s-1} dt.$$

Chamando $\tau = \frac{t-t_0}{1-(1-q)t_0} \Rightarrow t = \tau + t_0 - (1-q)\tau t_0$, portanto $dt = d\tau[1-(1-q)t_0]$, e ainda, quando $t = 0$, $\tau = \frac{-t_0}{1-(1-q)t_0}$, ficamos com

$$\begin{aligned} & \mathcal{L}_q \left\{ f \left(\frac{t-t_0}{1-(1-q)t_0} \right) \theta \left(\frac{t-t_0}{1-(1-q)t_0} \right) \right\} \\ &= \int_{\frac{-t_0}{1-(1-q)t_0}}^\infty f(\tau)\theta(\tau) [1-(1-q)[\tau+t_0-(1-q)\tau t_0]]^{s-1} [1-(1-q)t_0] d\tau \\ &= \int_{\frac{-t_0}{1-(1-q)t_0}}^\infty f(\tau)\theta(\tau) \{[1-(1-q)\tau][1-(1-q)t_0]\}^{s-1} [1-(1-q)t_0] d\tau \\ &= [1-(1-q)t_0]^{s-1} \int_0^\infty f(\tau) [\exp_q(-\tau)]^s d\tau \\ &= [\exp_q(-t_0)]^{s-1+q} \mathcal{L}_q \{f(t)\}, \end{aligned}$$

que é a Eq. (3.24).

(vi) Transformação de derivadas

Podemos expressar estas propriedades através de duas formas (vamos ilustrar apenas com as duas primeiras derivadas; derivadas superiores são obtidas similarmente).

(a) 1ª forma

$$\mathcal{L}_q \{f'(t)\} = s \mathcal{L}_q \left\{ \frac{f(t)}{1-(1-q)t} \right\} - f(0), \quad (3.25)$$

$$\mathcal{L}_q \{f''(t)\} = s(s-(1-q)) \mathcal{L}_q \left\{ \frac{f(t)}{[1-(1-q)t]^2} \right\} - f'(0) - sf(0). \quad (3.26)$$

Para $q = 1$,

$$\mathcal{L}_1\{f'(t)\} = s\mathcal{L}_1\{f(t)\} - f(0),$$

$$\mathcal{L}_1\{f''(t)\} = s^2\mathcal{L}_1f(t) - f'(0) - sf(0).$$

Demonstração:

Para a 1ª derivada, usando a definição (3.2), temos

$$\mathcal{L}_q\{f'(t)\} = \int_0^\infty \frac{df}{dt} [1 - (1-q)t]^{1-\frac{s}{q}} dt.$$

Chamando $u = [1 - (1-q)t]^{1-\frac{s}{q}} \Rightarrow du = -s[1 - (1-q)t]^{-\frac{s}{q}-1} dt$, e $dv = \frac{df}{dt} dt \Rightarrow v = f$, e fazendo integração por partes, temos

$$\mathcal{L}_q\{f'\} = [1 - (1-q)t]^{1-\frac{s}{q}} f \Big|_0^\infty + s \int_0^\infty \frac{f(t) [1 - (1-q)t]^{1-\frac{s}{q}}}{[1 - (1-q)t]} dt,$$

o que implica a Eq. (3.25). Para a 2ª derivada, o procedimento para demonstração é similar. Por integração por partes, temos

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_q\{f''\} &= \int_0^\infty \frac{d^2f}{dt^2} [1 - (1-q)t]^{1-\frac{s}{q}} dt \\ &= [1 - (1-q)t]^{1-\frac{s}{q}} f' \Big|_0^\infty + s \int_0^\infty \frac{df}{dt} \frac{[1 - (1-q)t]^{1-\frac{s}{q}}}{[1 - (1-q)t]} dt \\ &= f'(0) + s\mathcal{L} \left\{ \frac{f'}{[1 - (1-q)t]} \right\} \end{aligned}$$

Novamente integrando por partes, com $u = [1 - (1-q)t]^{1-\frac{s}{q}-1} \Rightarrow du = -(s-1+q)[1 - (1-q)t]^{-\frac{s}{q}-2} dt$, e $dv = \frac{df}{dt} dt \Rightarrow v = f$, temos a Eq. (3.26).

(b) 2ª forma

$$\mathcal{L}_q \left\{ \frac{d}{dt} [[1 - (1-q)t] f(t)] \right\} = s\mathcal{L}_q\{f(t)\} - f(0), \text{ para } s > q - 1, \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_q \left\{ \frac{d}{dt} \left[[1 - (1-q)t] \frac{d}{dt} [[1 - (1-q)t] f(t)] \right] \right\} = \\ s^2\mathcal{L}_q\{f(t)\} - f'(0) - sf(0) + (1-q)f(0). \end{aligned} \quad (3.28)$$

Demonstração:

Usando (3.2), temos

$$\mathcal{L}_q \left\{ \frac{d}{dt} [[1 - (1 - q)t] f(t)] \right\} = \int_0^\infty \frac{d}{dt} [[1 - (1 - q)t] f(t)] [1 - (1 - q)t]^{\frac{s}{1-q}} dt.$$

Fazendo $u = [1 - (1 - q)t]^{\frac{s}{1-q}} \Rightarrow du = -s[1 - (1 - q)t]^{\frac{s}{1-q}-1} dt$, e $dv = \frac{d}{dt} [[1 - (1 - q)t] f(t)] dt \Rightarrow v = [1 - (1 - q)t] f(t)$, temos que

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_q \left\{ \frac{d}{dt} [[1 - (1 - q)t] f(t)] \right\} &= [1 - (1 - q)t]^{\frac{s}{1-q}+1} \Big|_0^\infty \\ &\quad + s \int_0^\infty f(t) [1 - (1 - q)t]^{\frac{s}{1-q}} dt. \end{aligned}$$

Supondo que $[1 - (1 - q)t]^{\frac{s}{1-q}+1} f(t) \rightarrow 0$ em $t \rightarrow \infty$, temos a Eq. (3.27). A 2ª derivada é obtida analogamente.

A mais comum aplicação da transformada de Laplace reside na solução de equações diferenciais lineares. Para tanto, tira-se proveito da propriedade $\mathcal{L}_1 \{f'(t)\} = s\mathcal{L}_1\{f(t)\} - f(0)$, para transformar equações diferenciais em equações algébricas no domínio s . Nesta versão generalizada, as propriedades correspondentes, Equações (3.25)–(3.28), também podem ser utilizadas com o mesmo propósito, na solução de equações diferenciais nas quais as derivadas apareçam na forma $d/dt \{ [1 - (1 - q)t] f(t) \}$. Particularmente, $\exp_q(\pm\lambda t)$, $\lambda > 0$ é solução da equação diferencial

$$\frac{d}{dt} \left\{ [1 \pm (1 - q)\lambda t] f(t) \right\} = \pm(2 - q)\lambda f(t). \quad (3.29)$$

(vii) Derivadas de q -transformadas

$$F'_q(s) = \mathcal{L}_q \left\{ [\ln_1[\exp_q(-t)]] f(t) \right\}, \quad (3.30)$$

$$F_q^{(n)}(s) = \mathcal{L}_q \left\{ [\ln_1^n[\exp_q(-t)]] f(t) \right\}. \quad (3.31)$$

Para $q = 1$,

$$F'_1(s) = \mathcal{L}_1\{-tf(t)\},$$

$$F_1^{(n)}(s) = \mathcal{L}_1\{(-t)^n f(t)\}.$$

Demonstração:

Como sempre, retomando a definição de q -transformada de Laplace, Eq.(3.2), temos

$$\begin{aligned} F'_q(s) &= \frac{d}{ds} \int_0^\infty f(t)[1 - (1-q)t]^{s-1} dt \\ &= \int_0^\infty f(t)[1 - (1-q)t]^{s-1} \frac{1}{1-q} \ln_1[1 - (1-q)t] dt \\ &= \int_0^\infty f(t) \ln_1[1 - (1-q)t]^{s-1} [1 - (1-q)t]^{s-1} dt \\ &= \mathcal{L}_q \{ [\ln_1[\exp_q(-t)]] f(t) \}. \end{aligned}$$

Façamos a 2ª derivada:

$$\begin{aligned} F''_q(s) &= \frac{d^2}{ds^2} \int_0^\infty f(t)[1 - (1-q)t]^{s-1} dt \\ &= \frac{d}{ds} \int_0^\infty f(t)[1 - (1-q)t]^{s-1} \ln_1[1 - (1-q)t]^{s-1} dt \\ &= \int_0^\infty f(t) \ln_1^2[1 - (1-q)t]^{s-1} [1 - (1-q)t]^{s-1} dt \\ &= \mathcal{L}_q \{ [\ln_1^2[\exp_q(-t)]] f(t) \}. \end{aligned}$$

Por indução, temos a Eq. (3.31).

(viii) q -Transformadas de integrais

Aqui também duas possíveis formas de expressão:

(a) 1ª forma

$$\mathcal{L}_q \left\{ \int_0^t f(\lambda) d\lambda \right\} = \frac{1}{s+1-q} \mathcal{L}_q \{ [1 - (1-q)t] f(t) \} \quad (3.32)$$

Para $q = 1$,

$$\mathcal{L}_1 \left\{ \int_0^t f(\lambda) d\lambda \right\} = \frac{1}{s} \mathcal{L}_1 \{ f(t) \}.$$

Demonstração:

Consideremos o q -produto de convolução, Eq. (3.38), na forma

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_q\{1 *_q g(t)\} &= \mathcal{L}_q\left\{\int_0^t \frac{g(\lambda)}{1 - (1-q)\lambda} d\lambda\right\} \\ &= \mathcal{L}_q\{1\}\mathcal{L}_q\{g(t)\} \\ &= \frac{1}{s + 1 - q}\mathcal{L}_q\{g(t)\}.\end{aligned}$$

Identificando $f(t) = \frac{g(\lambda)}{1 - (1-q)\lambda}$, temos a Eq. (3.32).

(b) 2ª forma

$$\mathcal{L}_q\left\{\frac{\int_0^t f(\lambda)d\lambda}{1 - (1-q)t}\right\} = \frac{1}{s}\mathcal{L}_q\{f(t)\}. \quad (3.33)$$

Demonstração:

Temos que

$$\mathcal{L}_q\left\{\int_0^t f(\lambda) d\lambda\right\} = \int_0^\infty \left[\int_0^t f(\lambda)d\lambda\right] [1 - (1-q)t]^{t^{-q}} dt$$

Chamemos $g = \int_0^t f(\lambda)d\lambda \Rightarrow g' = f(\lambda)$. Assim, de acordo com a propriedade (3.25), temos

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_q\{g'\} &= s\mathcal{L}_q\left\{\frac{g(t)}{1 - (1-q)t}\right\} - g(0) \\ &= s\mathcal{L}_q\left\{\frac{g(t)}{1 - (1-q)t}\right\},\end{aligned}$$

pois $g(0) = 0$.

(ix) Integração de q -transformadas

$$\int_s^\infty F_q(u)du = \mathcal{L}_q\left\{\frac{-f(t)}{\ln_1[\exp_q(-t)]}\right\}, \quad (3.34)$$

$$\int_s^\infty \cdots \int_s^\infty F_q(u)d^n u = \mathcal{L}_q\left\{\frac{(-1)^n f(t)}{\ln_1^n[\exp_q(-t)]}\right\}. \quad (3.35)$$

Para $q = 1$,

$$\int_s^\infty F_1(u) du = \mathcal{L}_1 \left\{ \frac{f(t)}{t} \right\},$$

$$\int_s^\infty \cdots \int_s^\infty F_1(u) d^n u = \mathcal{L}_1 \left\{ \frac{f(t)}{t^n} \right\}.$$

Demonstração:

Para integração simples, temos:

$$\begin{aligned} \int_s^\infty F_q(u) du &= \int_s^\infty du \int_0^\infty f(t) [1 - (1-q)t]^{1-\frac{u}{q}} \\ &= \int_0^\infty dt f(t) \int_s^\infty [1 - (1-q)t]^{1-\frac{u}{q}} du \\ &= \int_0^\infty dt f(t) (1-q) \frac{[1 - (1-q)t]^{1-\frac{u}{q}}}{\ln[1 - (1-q)t]} \Bigg|_{u=s}^\infty \\ &= \int_0^\infty dt f(t) \frac{-[1 - (1-q)t]^{1-\frac{s}{q}}}{\ln_1[\exp_q(-t)]} \\ &= \mathcal{L}_q \left\{ \frac{-f(t)}{\ln_1[\exp_q(-t)]} \right\}. \end{aligned}$$

Façamos para integral dupla:

$$\begin{aligned} \int_s^\infty \int_{u_2}^\infty F_q(u_1) du_1 du_2 &= \int_s^\infty du_2 \int_{u_2}^\infty du_1 \int_0^\infty f(t) [1 - (1-q)t]^{1-\frac{u}{q}} dt \\ &= \int_s^\infty du_2 \int_0^\infty dt f(t) \int_{u_2}^\infty [1 - (1-q)t]^{1-\frac{u_1}{q}} du_1 \\ &= \int_s^\infty du_2 \int_0^\infty \frac{(-1)f(t)}{\ln_1[\exp_q(-t)]} [1 - (1-q)t]^{1-\frac{u_2}{q}} dt \\ &= \int_0^\infty dt \frac{(-1)f(t)}{\ln_1[\exp_q(-t)]} \int_s^\infty [1 - (1-q)t]^{1-\frac{u_2}{q}} du_2 \\ &= \int_0^\infty dt \frac{(-1)f(t)}{\ln_1[\exp_q(-t)]} \frac{(-1)}{\ln_1[\exp_q(-t)]} [1 - (1-q)t]^{1-\frac{s}{q}} \\ &= \mathcal{L}_q \left\{ \frac{(-1)^2 f(t)}{\ln_1^2[\exp_q(-t)]} \right\}. \end{aligned}$$

Por indução, temos a integral múltipla, Eq. (3.35).

(x) Produto de q -transformadas

$$\mathcal{L}_q\{f(t)\}\mathcal{L}_q\{g(t)\} = \mathcal{L}_q\{(f *_q g)(t)\}, \quad (3.36)$$

onde $(f *_q g)(t)$ é o q -produto de convolução de f e g , definido adiante (Eq. (3.38)).

Para $q = 1$,

$$\mathcal{L}_1\{f(t)\}\mathcal{L}_1\{g(t)\} = \mathcal{L}_1\{(f * g)(t)\}.$$

Demonstração:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_q\{f(t)\}\mathcal{L}_q\{g(t)\} &= \left[\int_0^\infty f(\tau) [\exp_q(-\tau)]^s d\tau \right] \left[\int_0^\infty g(\lambda) [\exp_q(-\lambda)]^s d\lambda \right] \\ &= \int_0^\infty d\lambda g(\lambda) \left[\int_0^\infty f(\tau) [\exp_q(-\lambda)]^s [\exp_q(-\tau)]^s d\tau \right] \\ &= \int_0^\infty d\lambda g(\lambda) \left[\int_0^\infty f(\tau) [\exp_q[-(\tau + \lambda - (1-q)\tau\lambda)]]^s d\tau \right]. \end{aligned}$$

Façamos a mudança de variáveis $t = \tau + \lambda - (1-q)\tau\lambda$, $\Rightarrow \tau = \frac{t-\lambda}{1-(1-q)\lambda}$, com $t = \lambda$ quando $\tau = 0$; ainda temos $dt = d\tau[1 - (1-q)\lambda]$. Com isso, temos

$$\mathcal{L}_q\{f(t)\}\mathcal{L}_q\{g(t)\} = \int_0^\infty d\lambda g(\lambda) \left[\int_\lambda^\infty f\left(\frac{t-\lambda}{1-(1-q)\lambda}\right) \frac{[\exp_q(-t)]^s dt}{[1-(1-q)\lambda]} \right] d\lambda.$$

Vamos mudar o limite de integração λ da integral interna acima, usando a função degrau unitário de Heaviside,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_q\{f(t)\}\mathcal{L}_q\{g(t)\} &= \int_0^\infty d\lambda g(\lambda) \left[\int_0^\infty dt f\left(\frac{t-\lambda}{1-(1-q)\lambda}\right) \Theta(t-\lambda) \frac{[\exp_q(-t)]^s}{[1-(1-q)\lambda]} \right] \\ &= \int_0^\infty dt [\exp_q(-t)]^s \left[\int_0^\infty d\lambda f\left(\frac{t-\lambda}{1-(1-q)\lambda}\right) \frac{g(\lambda)\Theta(t-\lambda)}{1-(1-q)\lambda} \right] \\ &= \int_0^\infty dt [\exp_q(-t)]^s \left[\int_0^t f\left(\frac{t-\lambda}{1-(1-q)\lambda}\right) \frac{g(\lambda)}{1-(1-q)\lambda} d\lambda \right] \\ &= \mathcal{L}_q \left\{ \int_0^t f\left(\frac{t-\lambda}{1-(1-q)\lambda}\right) \frac{g(\lambda)}{1-(1-q)\lambda} d\lambda \right\} \end{aligned}$$

que, com a definição (3.38), é a Eq. (3.36).

Terminamos aqui a listagem das propriedades da q -transformada de Laplace. Vamos definir, então, o q -produto de convolução, utilizado anteriormente. Retomemos inicialmente a definição usual do produto de convolução. Consideremos um processo aleatório, p. ex., difusão, no qual estamos interessados em alcançar a posição x em dois passos. No primeiro, nos deslocamos uma distância λ , com probabilidade $f(\lambda)$, e no segundo, temos um deslocamento adicional de λ' , com probabilidade $g(\lambda')$. A probabilidade de alcançarmos $x = \lambda + \lambda'$ em dois passos é dada pelo produto de convolução entre $f(\lambda)$ e $g(\lambda')$, onde são integrados todos os possíveis caminhos:

$$\begin{aligned} (f * g)(x) &\equiv \int_0^x d\lambda \int_0^\lambda d\lambda' f(\lambda) g(\lambda') \delta(x - (\lambda + \lambda')) \\ &= \int_0^x f(x - \lambda) g(\lambda) d\lambda. \end{aligned} \quad (3.37)$$

A generalização do produto de convolução foi feita por Tsallis e Prato [89], na forma

$$\begin{aligned} (f *_q g)(x) &\equiv \int_0^x d\lambda \int_0^\lambda d\lambda' f(\lambda) g(\lambda') \delta(x - [\lambda + \lambda' - (1 - q)\lambda\lambda']) \\ &= \int_0^x f\left(\frac{x - \lambda}{1 - (1 - q)\lambda}\right) \frac{g(\lambda)}{1 - (1 - q)\lambda} d\lambda. \end{aligned} \quad (3.38)$$

De fato, a transformação (3.38) é uma extensão direta do produto paralelo, introduzido em [91, 92]. Vamos colocar três propriedades da q -convolução:

- (i) Distributividade da q -convolução em relação à adição e à multiplicação

$$f *_q (ag + bh) = a(f *_q g) + b(f *_q h). \quad (3.39)$$

A demonstração é imediata.

- (ii) Comutatividade da q -convolução

$$f *_q g = g *_q f. \quad (3.40)$$

Demonstração:

Façamos, na Eq. (3.38), a mudança de variáveis $z = \frac{x - \lambda}{1 - (1 - q)\lambda}$, $\Rightarrow \lambda = \frac{x - z}{1 - (1 - q)z}$, e

$d\lambda = -dz \left[\frac{1-(1-q)x}{[1-(1-q)z]^2} \right]$. Quando $\lambda = x$, $z = 0$, e quando $\lambda = 0$, $z = x$. Com isso, temos que

$$\begin{aligned} f *_q g &= \int_0^x f(z) g \left(\frac{x-z}{1-(1-q)z} \right) \frac{1}{1-(1-q)z} dz \\ &= g *_q f. \end{aligned}$$

(iii) Associatividade da q -convolução

$$f *_q (g *_q h) = (f *_q g) *_q h. \quad (3.41)$$

Demonstração:

Suponhamos que $u = g *_q h$. De acordo com a Eq. (3.36), temos que

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_q\{u\} &= \mathcal{L}_q\{g *_q h\} \\ &= \mathcal{L}_q\{g\} \mathcal{L}_q\{h\}. \end{aligned}$$

A q -convolução de f com u fica

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_q\{f *_q u\} &= \mathcal{L}_q\{f\} \mathcal{L}_q\{u\} \\ &= \mathcal{L}_q\{f\} \mathcal{L}_q\{g\} \mathcal{L}_q\{h\} \\ &= \mathcal{L}_q\{f *_q g\} \mathcal{L}_q\{h\} \\ &= \mathcal{L}_q\{(f *_q g) *_q h\}. \end{aligned}$$

Ou seja,

$$\mathcal{L}_q\{f *_q (g *_q h)\} = \mathcal{L}_q\{(f *_q g) *_q h\}.$$

Aplicando o operador \mathcal{L}_q^{-1} em ambos os lados da expressão acima, temos (3.41).

3.3 q -Transformadas de Laplace de algumas funções elementares

Nesta Seção listamos q -transformadas de Laplace de algumas funções particulares. Algumas demonstrações são diretas e, por isso, não estão incluídas.

(i) Função unidade

$$\mathcal{L}_q\{1\} = \frac{1}{s+1-q}, \quad \begin{cases} s > q-1 & \text{para } q \geq 1, \\ s > 0 & \text{para } q \leq 1, \end{cases} \quad (3.42)$$

Para $q = 1$, temos $\mathcal{L}_1\{1\} = 1/s$.

Demonstração:

Vamos escrever a q -transformada como

$$\mathcal{L}_q\{1\} = \int_0^{t_{sup}} [1 - (1-q)t]^{s/(1-q)} dt.$$

onde $t_{sup} = \infty$ para $q > 1$, e $t_{sup} = \frac{1}{1-q}$ para $q < 1$, em consequência do corte da q -exponencial. Com a mudança de variáveis $u = [1 - (1-q)t] \Rightarrow du = -(1-q) dt$, temos

$$\mathcal{L}_q\{1\} = \frac{-1}{(1-q)} \int_1^{u(t_{sup})} u^{s/(1-q)} du.$$

Para $q > 1$, temos

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_q\{1\} &= \frac{-1}{(1-q)} \left. \frac{u^{s/(1-q)+1}}{\frac{s}{1-q} + 1} \right|_1^{-\infty} \\ &= \frac{1}{s+1-q}, \end{aligned}$$

desde que $\frac{s}{1-q} + 1 < 0$, para que o limite $u \rightarrow -\infty$ se anule, ou seja, $s > q-1$. Para $q < 1$, temos

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_q\{1\} &= \frac{-1}{(1-q)} \left. \frac{u^{s/(1-q)+1}}{\frac{s}{1-q} + 1} \right|_1^0 \\ &= \frac{1}{s+1-q}, \end{aligned}$$

desde que $\frac{s}{1-q} + 1 > 0$, ou seja, $s > q-1$. Como $(q-1) < 0$, a condição $s > 0$ prevalece.

(ii) δ de Dirac

$$\mathcal{L}_q\{\delta(t)\} = 1. \quad (3.43)$$

A demonstração é consequência imediata da definição da δ .

(iii) Função degrau unitário de Heaviside

$$\mathcal{L}_q\{\theta(t - t_0)\} = \frac{[\exp_q(-t_0)]^{s+1-q}}{s+1-q} \begin{cases} s > q - 1 & \text{para } q \geq 1, \\ s > 0 & \text{para } q \leq 1. \end{cases} \quad (3.44)$$

Para $q = 1$, $\mathcal{L}_1\{\theta(t - t_0)\} = e^{-st_0}/s$. A demonstração é também imediata, com a definição de θ e da Eq. (3.42).

(iv) Potências

Para potências inteiras, temos

$$\mathcal{L}_q\{t^{n-1}\} = \frac{(n-1)!}{[s + (1-q)][s + 2(1-q)] \cdots [s + n(1-q)]},$$

se $\begin{cases} s > n(q-1) & \text{para } q > 1, \\ s > (q-1) & \text{para } q < 1. \end{cases}$

(3.45)

Esta Equação pode ser re-escrita mais compactamente como

$$\mathcal{L}_q\{t^{n-1}\} = \frac{(n-1)!}{s^n Q_n(2-q)}, \quad (3.46)$$

sendo $Q_n(q)$ uma função polinomial dada por [67]

$$Q_n(q) \equiv 1 \cdot q(2q-1)(3q-2) \cdots [nq - (n-1)]. \quad (3.47)$$

Para $q = 1$, $\mathcal{L}_1\{t^{n-1}\} = (n-1)!/s$.

Demonstração:

Vamos mostrar a q -transformada para t , t^2 , e, por indução, t^n :

$$\mathcal{L}_q\{t\} = \int_0^{t_{sup}} t[1 - (1-q)t]^{-\frac{s}{1-q}} dt.$$

Integremos por partes, chamando $u = t \Rightarrow du = dt$, e $dv = [1 - (1 - q)t]^{\frac{s}{1-q}} dt$,
 $\Rightarrow v = -\frac{[1 - (1 - q)t]^{\frac{s}{1-q} + 1}}{s + 1 - q}$. Assim,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_q\{t\} &= \frac{-t[1 - (1 - q)t]^{\frac{s}{1-q} + 1}}{s + 1 - q} \Big|_0^{t_{sup}} + \int_0^{t_{sup}} \frac{[1 - (1 - q)t]^{\frac{s}{1-q} + 1}}{s + 1 - q} dt \\ &= \frac{-1}{s + q - 1} \lim_{t \rightarrow t_{sup}} t[1 - (1 - q)t]^{\frac{s}{1-q} + 1} - \frac{1}{1 - q} \frac{1}{s + 1 - q} \frac{[1 - (1 - q)t]^{\frac{s}{1-q} + 2}}{\frac{s}{1-q} + 2} \Big|_0^{t_{sup}} \\ &= \frac{-1}{s + q - 1} \lim_{t \rightarrow t_{sup}} t[1 - (1 - q)t]^{\frac{s}{1-q} + 1} \\ &\quad - \frac{1}{(s + 1 - q)(s + 2(1 - q))} \left\{ \lim_{t \rightarrow t_{sup}} [1 - (1 - q)t]^{\frac{s}{1-q} + 2} - 1 \right\}. \end{aligned}$$

Vamos analisar as condições necessárias para que os limites acima se anulem e a q -transformada exista. Iniciemos com $q > 1$, que corresponde a $t_{sup} \rightarrow \infty$:

- $\lim_{t \rightarrow \infty} t[1 - (1 - q)t]^{\frac{s}{1-q} + 1} \approx (-1)(1 - q) \lim_{t \rightarrow \infty} t^{\frac{s}{1-q} + 2} = 0$ se $\frac{s}{1-q} + 2 < 0 \Rightarrow s > 2(q - 1)$.
- $\lim_{t \rightarrow \infty} [1 - (1 - q)t]^{\frac{s}{1-q} + 2} = 0$ se $s > 2(q - 1)$.

Façamos agora o caso $q < 1$, para o qual $t_{sup} = 1/(1 - q)$:

- $\lim_{t \rightarrow \frac{1}{1-q}} t[1 - (1 - q)t]^{\frac{s}{1-q} + 1} = 0$ se $\frac{s}{1-q} + 2 > 0 \Rightarrow s > (q - 1)$.
- $\lim_{t \rightarrow \infty} [1 - (1 - q)t]^{\frac{s}{1-q} + 2} = 0$ se $s > 2(q - 1)$.

Como $q < 1$, a condição que predomina é $s > q - 1$, e assim,

$$\mathcal{L}_q\{t\} = \frac{1}{[s + (1 - q)][s + 2(1 - q)]} \quad \text{se } \begin{cases} s > 2(q - 1) \text{ para } q > 1, \\ s > (q - 1) \text{ para } q < 1. \end{cases} \quad (3.48)$$

Consideremos agora t^2 , i.e.,

$$\mathcal{L}_q\{t^2\} = \int_0^{t_{sup}} t^2 [1 - (1 - q)t]^{\frac{s}{1-q}} dt.$$

Integrando por partes, com $u = t^2 \Rightarrow du = 2t dt$, e $dv = [1 - (1 - q)t]^{1-\frac{s}{1-q}} dt$,
 $\Rightarrow v = -\frac{[1 - (1 - q)t]^{1-\frac{s}{1-q}} + 1}{s + 1 - q}$, temos

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_q\{t^2\} &= \frac{-t^2[1 - (1 - q)t]^{1-\frac{s}{1-q}} + 1}{s + 1 - q} \Big|_0^{t_{sup}} + \frac{2}{s + 1 - q} \int_0^{t_{sup}} t[1 - (1 - q)t]^{1-\frac{s}{1-q}} dt \\ &= \frac{-1}{s + q - 1} \lim_{t \rightarrow t_{sup}} t^2[1 - (1 - q)t]^{1-\frac{s}{1-q}} \\ &\quad + \frac{2}{s + 1 - q} \left\{ \frac{-t[1 - (1 - q)t]^{1-\frac{s}{1-q}} + 2}{s + 2(1 - q)} \Big|_0^{t_{sup}} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{s + 2(1 - q)} \int_0^{t_{sup}} [1 - (1 - q)t]^{1-\frac{s}{1-q}} dt \right\} \\ &= \frac{-1}{s + q - 1} \lim_{t \rightarrow t_{sup}} t^2[1 - (1 - q)t]^{1-\frac{s}{1-q}} \\ &\quad - \frac{2}{[s + 1 - q][s + 2(1 - q)]} \lim_{t \rightarrow t_{sup}} t[1 - (1 - q)t]^{1-\frac{s}{1-q}} + 2 \\ &\quad - \frac{2}{[s + 1 - q][s + 2(1 - q)][s + 3(1 - q)]} \left\{ \lim_{t \rightarrow t_{sup}} [1 - (1 - q)t]^{1-\frac{s}{1-q}} + 3 - 1 \right\}. \end{aligned}$$

Temos agora três limites para analisar, em dois casos. Para $q > 1$, temos

- $\lim_{t \rightarrow \infty} t^2[1 - (1 - q)t]^{1-\frac{s}{1-q}} \approx (-1)(1 - q) \lim_{t \rightarrow \infty} t^{1-\frac{s}{1-q}} + 3$
- $\lim_{t \rightarrow \infty} t[1 - (1 - q)t]^{1-\frac{s}{1-q}} \approx (-1)(1 - q) \lim_{t \rightarrow \infty} t^{1-\frac{s}{1-q}} + 3$
- $\lim_{t \rightarrow \infty} [1 - (1 - q)t]^{1-\frac{s}{1-q}} \approx (-1)(1 - q) \lim_{t \rightarrow \infty} t^{1-\frac{s}{1-q}} + 3$

ou seja, os três limites acima são assintoticamente idênticos, e eles se anulam quando $\frac{s}{1-q} + 3 < 0$, i.e., $s > 3(q - 1)$. Agora vejamos as condições para que os limites se anulem quando $q < 1$:

- $\lim_{t \rightarrow \frac{1}{1-q}} t^2[1 - (1 - q)t]^{1-\frac{s}{1-q}} = 0$, se $\frac{s}{1-q} + 1 > 0 \Rightarrow s > q - 1$
- $\lim_{t \rightarrow \frac{1}{1-q}} t[1 - (1 - q)t]^{1-\frac{s}{1-q}} = 0$, se $\frac{s}{1-q} + 2 > 0 \Rightarrow s > 2(q - 1)$
- $\lim_{t \rightarrow \frac{1}{1-q}} [1 - (1 - q)t]^{1-\frac{s}{1-q}} = 0$, se $\frac{s}{1-q} + 3 > 0 \Rightarrow s > 3(q - 1)$

Como $(q - 1) < 0$, a condição dominante é $s > q - 1$. Assim,

$$\mathcal{L}_q\{t^2\} = \frac{2}{[s + (1 - q)][s + 2(1 - q)][s + 3(1 - q)]}, \quad \text{se } \begin{cases} s > 3(q - 1) \text{ para } q > 1, \\ s > (q - 1) \text{ para } q < 1. \end{cases} \quad (3.49)$$

Repetindo o procedimento anterior, chega-se também a

$$\mathcal{L}_q\{t^3\} = \frac{3 \cdot 2}{[s + (1 - q)][s + 2(1 - q)][s + 3(1 - q)][s + 4(1 - q)]},$$

se $\begin{cases} s > 4(q - 1) \text{ para } q > 1, \\ s > (q - 1) \text{ para } q < 1. \end{cases}$ (3.50)

As Eq.s (3.48)–(3.50), induzem à Eq. (3.45).

Para potências reais, (não necessariamente inteiras), temos

$$\mathcal{L}_q\{t^{\alpha-1}\} = \begin{cases} \Gamma(\alpha) \frac{\Gamma\left(\frac{s}{q-1} - \alpha\right)}{(q-1)^\alpha \Gamma\left(\frac{s}{q-1}\right)}, & s > \alpha(q-1) \text{ para } q \geq 1, \\ \Gamma(\alpha) \frac{\Gamma\left(\frac{s}{1-q} + 1\right)}{(1-q)^\alpha \Gamma\left(\frac{s}{1-q} + \alpha + 1\right)}, & s > 0 \text{ para } q \leq 1. \end{cases} \quad (3.51)$$

Para $q = 1$, $\mathcal{L}_1\{t^{\alpha-1}\} = \Gamma(\alpha)$.

Demonstração:

Para tratarmos potências reais (não necessariamente inteiras), é necessário fazeremos uso das representações integrais da q -exponencial (Seção 2.4). Para $q > 1$, consideramos a Equação (2.74) e temos

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_q\{t^\alpha\} &= \int_0^\infty t^\alpha [1 - (1 - q)t]^{1-\frac{s}{q-1}} dt \\ &= \frac{1}{\Gamma\left(\frac{s}{q-1}\right)} \int_0^\infty dt t^\alpha \int_0^\infty du u^{\frac{s}{q-1}-1} e^{-u} e^{-(q-1)ut} \\ &= \frac{1}{\Gamma\left(\frac{s}{q-1}\right)} \int_0^\infty du u^{\frac{s}{q-1}-1} e^{-u} \int_0^\infty dt t^\alpha e^{-(q-1)ut}. \end{aligned}$$

A integral interna da Equação anterior pode ser identificada com a função gama, Eq. (2.73), com $k = (q - 1)u$ e $\lambda = \alpha + 1$. Assim,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_q\{t^\alpha\} &= \frac{1}{\Gamma\left(\frac{s}{q-1}\right)} \int_0^\infty du u^{\frac{s}{q-1}-1} e^{-u} \frac{\Gamma(\alpha + 1)}{[(q - 1)u]^{\alpha+1}} \\ &= \frac{\Gamma(\alpha + 1)}{\Gamma\left(\frac{s}{q-1}\right)} \frac{1}{(q - 1)^{\alpha+1}} \int_0^\infty du u^{\frac{s}{q-1}-\alpha-2} e^{-u} \\ &= \frac{\Gamma(\alpha + 1)}{(q - 1)^{\alpha+1} \Gamma\left(\frac{s}{q-1}\right)} \Gamma\left(\frac{s}{q-1} - \alpha - 1\right), \end{aligned}$$

onde, mais uma vez, a integral anterior foi identificada com a função gama. Portanto

$$\mathcal{L}_q\{t^{\alpha-1}\} = \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma\left(\frac{s}{q-1} - \alpha\right)}{(q-1)^\alpha\Gamma\left(\frac{s}{q-1}\right)} \quad \text{se } s > \alpha(q-1) \text{ para } q > 1.$$

Quando $q < 1$, utilizamos a Equação (2.78), e temos

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_q\{t^{\alpha-1}\} &= \int_0^\infty t^{\alpha-1} [1 - (1-q)t]^{-\frac{s}{1-q}} dt \\ &= \frac{1}{(1-q)^\alpha} \frac{\Gamma\left(\frac{s}{q-1} + 1\right)}{2\pi} \int_0^\infty dt t^{\alpha-1} \int_{-\infty}^\infty du \frac{e_1^{1+iu} e_1^{-(1-q)(1+iu)t}}{(1+iu)^{\frac{s}{1-q}+1}} \\ &= \frac{1}{(1-q)^\alpha} \frac{\Gamma\left(\frac{s}{q-1} + 1\right)}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty du \frac{e_1^{1+iu}}{(1+iu)^{\frac{s}{1-q}+1}} \int_0^\infty dt t^{\alpha-1} e_1^{-(1-q)(1+iu)t}. \end{aligned}$$

A integral mais interna acima pode ser identificada com a função gama, Eq. (2.73), através da mudança de variáveis $(1+iu)(1-q)t = \lambda$. Com isso, temos

$$\mathcal{L}_q\{t^{\alpha-1}\} = \frac{1}{(1-q)^\alpha} \frac{\Gamma\left(\frac{s}{q-1} + 1\right)}{2\pi} \Gamma(\alpha) \int_{-\infty}^\infty du \frac{e_1^{1+iu}}{(1+iu)^{\frac{s}{1-q}+1}}.$$

A integral acima, por sua vez, também pode ser identificada com a função gama, de acordo com a representação dada pela Eq. (2.78), obtendo, então,

$$\mathcal{L}_q\{t^{\alpha-1}\} = \Gamma(\alpha) \frac{\Gamma\left(\frac{s}{1-q} + 1\right)}{(1-q)^\alpha \Gamma\left(\frac{s}{1-q} + \alpha + 1\right)} \quad \text{se } s > 0 \text{ para } q < 1. \quad (3.52)$$

(v) Função exponencial

A função e_1^{-at} ($a > 0$) é de ordem q -exponencial $\forall q$, e e_1^{at} ($a > 0$) é de ordem q -exponencial para $q < 1$ (em razão do corte). Suas q -transformadas de Laplace são (vide Ref. [85, Eq.s 3.383 5. e 3.383 1]):

$$\mathcal{L}_{q>1}\{e_1^{-at}\} = \frac{1}{q-1} \Psi\left(1, 2 - \frac{s}{q-1}; \frac{a}{q-1}\right), \quad (3.53)$$

$$\mathcal{L}_{q<1}\{e_1^{\pm at}\} = \frac{1}{s+1-q} {}_1F_1\left(1, \frac{s}{1-q} + 2; \frac{\pm a}{1-q}\right), \quad (3.54)$$

onde $\Psi(\alpha, \gamma; z)$ e ${}_1F_1(\alpha, \gamma; z)$ são as funções hipergeométricas confluentes.

$q = 1$: $\mathcal{L}_1\{e_1^{\pm at}\} = 1/(s \mp a)$, $s > \pm a$.

A demonstração é imediata, identificando as equações da Ref. [85] citadas.

(vi) Funções circulares

São obtidas diretamente por

$$\sin x = \frac{e_1^{ix} - e_1^{-ix}}{2i}, \quad \cos x = \frac{e_1^{ix} + e_1^{-ix}}{2},$$

ou através da identificação com as Eq.s 3.768 11 e 3.768 12 da Ref. [85]. Obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{q < 1}\{\sin(at)\} &= -\frac{i}{2} \frac{1}{s + 1 - q} \\ &\times \left[{}_1F_1\left(1, \frac{s}{1-q} + 2; \frac{ia}{1-q}\right) - {}_1F_1\left(1, \frac{s}{1-q} + 2; \frac{-ia}{1-q}\right) \right], \end{aligned} \quad (3.55)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{q < 1}\{\cos(at)\} &= \frac{1}{2} \frac{1}{s + 1 - q} \\ &\times \left[{}_1F_1\left(1, \frac{s}{1-q} + 2; \frac{ia}{1-q}\right) + {}_1F_1\left(1, \frac{s}{1-q} + 2; \frac{-ia}{1-q}\right) \right], \end{aligned} \quad (3.56)$$

$q = 1$:

$$\mathcal{L}_1\{\sin(at)\} = \frac{a}{s^2 + a^2}, \quad \mathcal{L}_1\{\cos(at)\} = \frac{s}{s^2 + a^2}.$$

(vii) Funções hiperbólicas

São obtidas diretamente por

$$\sinh x = \frac{e_1^x - e_1^{-x}}{2}, \quad \cosh x = \frac{e_1^x + e_1^{-x}}{2}.$$

Temos, então,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{q < 1}\{\sinh(at)\} &= \frac{1}{2} \frac{1}{s + 1 - q} \\ &\times \left[{}_1F_1\left(1, \frac{s}{1-q} + 2; \frac{a}{1-q}\right) - {}_1F_1\left(1, \frac{s}{1-q} + 2; \frac{-a}{1-q}\right) \right], \end{aligned} \quad (3.57)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{q < 1}\{\cosh(at)\} &= \frac{1}{2} \frac{1}{s + 1 - q} \\ &\times \left[{}_1F_1\left(1, \frac{s}{1-q} + 2; \frac{a}{1-q}\right) + {}_1F_1\left(1, \frac{s}{1-q} + 2; \frac{-a}{1-q}\right) \right]. \end{aligned} \quad (3.58)$$

$q = 1$:

$$\mathcal{L}_1\{\sinh(at)\} = \frac{a}{s^2 - a^2}, \quad \mathcal{L}_1\{\cosh(at)\} = \frac{s}{s^2 - a^2}.$$

(viii) Função q -exponencial

A função $f(t) = e_q^{at}$, com $q' = 1 + (1 - q)/a$, é de ordem q -exponencial a , e sua q -transformada de Laplace é dada por

$$\mathcal{L}_q\{e_q^{at}\} = \frac{1}{s + 1 - q - a}, \quad \begin{cases} s > a + q - 1 & \text{para } q > 1, \\ s > 0 & \text{para } q < 1. \end{cases} \quad (3.59)$$

Temos também as seguintes relações (vide Ref. [85, Eq.s 3.197 3. e 3.197 5]):

$$\mathcal{L}_{q>2}\{e_q^{at}\} = \frac{1}{a(q-2)} {}_2F_1\left(\frac{s}{q-1}, 1; 2 - \frac{1}{q-1}; -a^{-1}\right), \quad \begin{cases} s > 0, \\ a > 1 \end{cases} \quad (3.60)$$

$$\mathcal{L}_{q>1}\{e_q^{-at}\} = \frac{1}{s+2-q} {}_2F_1\left(\frac{1}{q-1}, 1; \frac{s+1}{q-1}; 1-a\right), \quad \begin{cases} s > q-2, \\ 0 < a < 2 \end{cases} \quad (3.61)$$

$$\mathcal{L}_{q<1}\{e_q^{\pm at}\} = \frac{1}{s+1-q} {}_2F_1\left(\frac{-1}{1-q}, 1; \frac{s}{1-q} + 2; \mp a\right), \quad \begin{cases} s > 0, \\ |a| < 1 \end{cases} \quad (3.62)$$

$$\mathcal{L}_{q<1}\{e_q^{-at}\} = \frac{1}{a(2-q)} {}_2F_1\left(\frac{-s}{1-q}, 1; \frac{1}{1-q} + 2; a^{-1}\right), \quad \begin{cases} s > 0, \\ a > 1 \end{cases} \quad (3.63)$$

onde ${}_2F_1(\alpha, \beta; \gamma; z)$ é a função Gaussiana hipergeométrica. Das Equações (3.60)-(3.63), encontramos as q -transformadas de Laplace do q -seno hiperbólico e q -co-seno hiperbólico, usando as relações [67]

$$\sinh_q x = \frac{e_q^x - e_q^{-x}}{2}, \quad (3.64)$$

$$\cosh_q x = \frac{e_q^x + e_q^{-x}}{2}. \quad (3.65)$$

3.4 Densidade de estados e q -função de partição clássica

Nesta Seção utilizamos a q -transformada de Laplace para estabelecer uma relação entre a q -função de partição clássica e a densidade de estados. Inicialmente utilizamos q -valores esperados não normalizados, como definidos em [19] (Equação (1.10), aqui com uma distribuição contínua de probabilidades $\rho(\mathbf{r})$, onde \mathbf{r} representa uma variável adimensional no espaço de fases)

$$\langle O \rangle_q = \int [\rho(\mathbf{r})]^q O(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (3.66)$$

A q -função de partição Z_q , que surge da otimização de S_q , Equação (1.8), escrita como

$$S_q \equiv k \frac{1 - \int d\mathbf{r} [\rho(\mathbf{r})]^q}{q - 1} \quad (3.67)$$

com o vínculo $\langle \mathcal{H} \rangle_q = U_q$ (\mathcal{H} é o Hamiltoniano) e também o vínculo usual de normalização

$$\int \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 1 \quad (3.68)$$

é

$$Z_q(\beta_q) = \int \exp_q[-\beta_q \mathcal{H}(\mathbf{r})] d\mathbf{r}, \quad (3.69)$$

que pode ser re-escrita como

$$Z_q(\beta_q) = \int_0^\infty g(E) \exp_q(-\beta_q E) dE, \quad (3.70)$$

onde $g(E)$ é a densidade de estados (i.e., $g(E) dE$ é o número de estados com energias entre E e $E + dE$). Agora fazemos a mudança de variáveis $\epsilon = \beta_q E$ e introduzimos um parâmetro mudo η na Equação (3.70), para que possamos identificá-la com a Equação (3.2)

$$\begin{aligned} Z_q(\beta_q) &= Z_q(\beta_q, \eta)|_{\eta=1} \\ &= \frac{1}{\beta_q} \int_0^\infty g(\epsilon/\beta_q) [1 - (1 - q)\epsilon]^{1/q} d\epsilon \Big|_{\eta=1} \\ &= \frac{1}{\beta_q} \mathcal{L}_q \{g(\epsilon/\beta_q)\}(\eta) \Big|_{\eta=1}. \end{aligned} \quad (3.71)$$

De acordo com a Equação (3.6), sua inversa é dada por

$$\begin{aligned} g(E) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} Z_q(\beta_q, \eta) [1 - (1-q)\epsilon]^{-\frac{\eta}{1-q}-1} d\eta \Big|_{\epsilon=\beta_q E} \\ &= \mathcal{L}_q^{-1} \{Z_q(\beta_q, \eta)\}(\epsilon) \Big|_{\epsilon=\beta_q E} \end{aligned} \quad (3.72)$$

A Equação (3.71) pode ser utilizada para encontrar a q -função de partição uma vez que seja conhecida a densidade de estados, e a Equação (3.72) pode ser usada no procedimento inverso.

Ilustremos este ponto com o gás ideal clássico, com q -função de partição re-escrita na forma

$$Z_q(\beta_q) = \frac{1}{N!} \int \prod_i \frac{d^3 x_i d^3 p_i}{h^3} \left[\exp_q \left(-\beta_q \sum_j \frac{p_j^2}{2m} \right) \right] \Big|_{\eta=1} \quad (3.73)$$

A q -função de partição (3.73) para o caso $q < 1$ fica [93]:

$$Z_{q<1}(\beta_q) = \frac{V^N}{N! h^{3N}} \left(\frac{2\pi m}{(1-q)\beta_q} \right)^{3N/2} \frac{\Gamma\left(\frac{\eta}{1-q} + 1\right)}{\Gamma\left(\frac{\eta}{1-q} + \frac{3N}{2} + 1\right)} \Big|_{\eta=1} \quad (3.74)$$

Para o caso $q > 1$, temos [20, 94]

$$Z_{q>1}(\beta_q) = \frac{V^N}{N! h^{3N}} \left(\frac{2\pi m}{(q-1)\beta_q} \right)^{3N/2} \frac{\Gamma\left(\frac{\eta}{q-1} - \frac{3N}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\eta}{q-1}\right)} \Big|_{\eta=1} \quad (3.75)$$

A integração da Equação (3.72) (vide Equações (20) e (22), pp. 349–350 da Ref. [95]), em ambos os casos, origina

$$g(E) = \frac{V^N}{N! h^{3N}} \frac{(2\pi m)^{3N/2}}{\Gamma\left(\frac{3N}{2}\right)} E^{3N/2-1}, \quad (3.76)$$

que é a densidade de estados do gás ideal clássico [96]. Para que tenhamos uma q -transformada de Laplace, a densidade de estados necessita ser de ordem q -exponencial. No caso $q < 1$, o corte garante esta condição de admissibilidade, mas no caso $q > 1$, $g(E)$ é de ordem q -exponencial (e, portanto, admite uma q -transformada de Laplace,

consequentemente uma q -função de partição) apenas se $1 < q < 1 + \frac{2}{3N}$ (para N grande). Esta faixa de validade é a mesma encontrada por [20, 94], e implica que não existe gás ideal clássico com $q > 1$ no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$).

Agora usamos o q -valor esperado *normalizado*, introduzido em [34] (Equação (1.28)):

$$\langle (O) \rangle_q = \frac{\int [\rho(\mathbf{r})]^q O(\mathbf{r}) d\mathbf{r}}{\int [\rho(\mathbf{r})]^q d\mathbf{r}}. \quad (3.77)$$

A q -função de partição que segue da otimização de (3.67) com os vínculos (3.68) e $\langle \langle \mathcal{H} \rangle \rangle_q = \bar{U}_q$, é dada por (vide Equação (1.36))

$$\bar{Z}_q(\bar{\beta}_q) = \int \exp_q \left[-\bar{\beta}_q \frac{(\mathcal{H}(\mathbf{r}) - U_q)}{\int [\rho(\mathbf{r}')]^q d\mathbf{r}'} \right] d\mathbf{r} \quad (3.78)$$

$$= \exp_q \left[\frac{\bar{\beta}_q U_q}{\int [\rho(\mathbf{r})]^q d\mathbf{r}} \right] Z'_q(\beta'_q), \quad (3.79)$$

onde $\bar{\beta}_q$ é o parâmetro de Lagrange e β'_q é definido por (Equação (1.40))

$$\beta'_q \equiv \frac{\bar{\beta}_q}{\int [\rho(\mathbf{r})]^q d\mathbf{r} + (1-q)\bar{\beta}_q \bar{U}_q} \quad (3.80)$$

e $Z'_q(\beta'_q)$ tem a mesma forma funcional da q -função de partição não normalizada (3.70)

$$Z'_q(\beta'_q) = \int_0^\infty g(E) \exp_q(-\beta'_q E) dE. \quad (3.81)$$

Com a mudança de variáveis $\epsilon = \beta'_q E$, temos a q -função de partição (3.70)

$$Z'_q(\beta'_q) = Z'_q(\beta'_q, \eta) \Big|_{\eta=1} = \frac{1}{\beta'_q} \mathcal{L}_q \{ g(\epsilon/\beta'_q) \} (\eta) \Big|_{\eta=1} \quad (3.82)$$

e

$$g(E) = \mathcal{L}_q^{-1} \{ Z'_q(\beta'_q, \eta) \} (\epsilon) \Big|_{\epsilon=\beta'_q E}. \quad (3.83)$$

Para finalizar esta seção mencionamos os demais possíveis núcleos, na generalização da transformada de Laplace, como sugerido no início da Seção 3.1. O núcleo $[\exp_q(+t)]^{-s}$ é equivalente ao que adotamos, através da mudança de variáveis $q = 2 - q'$ na Equação (3.2),

portanto não se trata de uma alternativa essencialmente nova. A utilização do núcleo $\exp_q(-st)$ (a primeira possibilidade que mencionamos) se trata de uma generalização diferente da que tratamos aqui. Esta faria a ligação entre $\bar{Z}_q(\bar{\beta}_q)$ e $g(E)$ através de uma (outra) q -transformada de Laplace que não necessitaria de um parâmetro mudo, como é o nosso caso. Seria uma generalização mais natural, dentro do formalismo não-extensivo. O ponto central para o seu desenvolvimento é a determinação da sua transformada inversa. Até onde estamos cientes, ainda não foi feito de uma forma geral. Um caso particular corresponde à representação integral da função degrau unitário de Heaviside, obtido em [97]:

$$\theta(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\beta-i\infty}^{\beta+i\infty} \frac{1}{s} \exp_q(sx) ds, \quad (3.84)$$

com a restrição que β deva satisfazer

$$1 - (q - 1)\beta x_{max} > 0. \quad (3.85)$$

Capítulo 4

Funções q -trigonométricas e q -hiperbólicas

Neste Capítulo fazemos uma extensão analítica da q -exponencial para o domínio complexo [67]. Definimos e ilustramos o comportamento geral das funções q -trigonométricas, desenvolvemos a versão q correspondente para o célebre Teorema de Pitágoras, analisamos o oscilador anarmônico que estas funções descrevem, e ainda tratamos das funções q -hiperbólicas.

4.1 Funções q -trigonométricas: definições e propriedades

A expansão em série de Taylor de $\exp_q x$ em torno a $x_0 = 0$ é dada por

$$\exp_q x = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} Q_{n-1} x^n, \quad (4.1)$$

com $Q_n(q)$ dado pela Equação (2.33). A q -exponencial de um número imaginário ix fica dada por

$$\begin{aligned} \exp_x(\pm ix) &= \left(1 - \frac{1}{2!} Q_1 x^2 + \frac{1}{4!} Q_3 x^4 - + \dots \right) \\ &\quad \pm i \left(x - \frac{1}{3!} Q_2 x^3 + \frac{1}{5!} Q_4 x^5 - + \dots \right). \end{aligned} \quad (4.2)$$

Esta expressão nos faz lembrar a fórmula de Euler, em análise complexa. Podemos escrever, então,

$$\exp_q(\pm ix) = \cos_q x \pm i \operatorname{sen}_q x, \quad (4.3)$$

onde $\cos_q x$ e $\text{sen}_q x$ representam as funções generalizadas q -co-seno e q -seno, respectivamente, definidas por

$$\cos_q x \equiv 1 + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-1)^j Q_{2j-1} x^{2j}}{(2j)!}, \quad (4.4)$$

$$\text{sen}_q x \equiv \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j Q_{2j} x^{2j+1}}{(2j+1)!}. \quad (4.5)$$

Na seqüência vamos mostrar que $\cos_q x$ e $\text{sen}_q x$ satisfazem formas gerais das relações trigonométricas usuais. O teste das razões mostra que as Equações (4.4)–(4.5) convergem absolutamente na região

$$|x| < |1 - q|^{-1}. \quad (4.6)$$

No limite $q \rightarrow 1$, estas expressões se reduzem às expansões em série de Taylor das funções exponencial, co-seno e seno usuais, tendo como raio de convergência $-\infty < x < \infty$.

Podemos escrever a q -exponencial na forma

$$\exp_q x = \exp_1 \left[\frac{\ln_1 [1 + (1 - q)x]}{1 - q} \right] \quad (\forall x \neq 1/(q - 1)). \quad (4.7)$$

Se usarmos a propriedade do logaritmo usual de um número complexo $z = |z|e^{i\phi}$, qual seja, $\ln_1 z = \ln_1 |z| + i\phi$, encontramos

$$\cos_q x = \rho_q(x) \cos_1[\varphi_q(x)], \quad (4.8)$$

$$\text{sen}_q x = \rho_q(x) \text{sen}_1[\varphi_q(x)], \quad (4.9)$$

onde

$$\begin{aligned} \rho_q^2(x) &= \exp_q[(1 - q)x^2] \\ &= [1 + (1 - q)^2 x^2]^{1-q} \end{aligned} \quad (4.10)$$

e

$$\varphi_q(x) = \frac{\arctan_1[(1-q)x]}{1-q}. \quad (4.11)$$

Podemos definir a q -tangente

$$\tan_q x \equiv \frac{\text{sen}_q x}{\text{cos}_q x}, \quad (4.12)$$

que também pode ser expressa por

$$\tan_q x = \tan_1[\varphi_q(x)]. \quad (4.13)$$

As Equações (4.8), (4.9) e (4.13) são interessantes, pois permitem expressar as q -funções trigonométricas em termos das funções trigonométricas usuais. O q -co-seno e o q -seno são compostos pelo produto de dois fatores: o primeiro, $\rho_q(x)$, é responsável pela amplitude, e o segundo é responsável pela natureza oscilatória destas funções. Notemos que o limite do seno para pequenos ângulos é preservado:

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\text{sen}_q x}{x} = 1 \quad (\forall q \in \mathbb{R}). \quad (4.14)$$

As Figuras 4.1 e 4.2 ilustram o comportamento de $\text{cos}_q x$ e $\text{sen}_q x$ para diferentes valores de q .

A representação paramétrica das destas funções,

$$\begin{aligned} x &= \text{cos}_q t \\ y &= \text{sen}_q t \\ z &= t \end{aligned} \quad (4.15)$$

representa uma hélice. A Figura 4.3 ilustra sua projeção no plano x - y , como vista do lado positivo de z ($t > 0$). Valores de q para os quais $\text{cos}_q t$ e $\text{sen}_q t$ oscilam, a representação paramétrica é uma espiral. Para $q > 1$, $\rho_q(t) \rightarrow 0$ quando $t \rightarrow \infty$, e assim as espirais vão a zero. Para $q < 1$, $\rho_q(t) \rightarrow \infty$ quando $t \rightarrow \infty$, e as espirais divergem. Em $q = 1$, as espirais degeneram em um círculo. Seria, pois, igualmente apropriado chamá-las de funções espirais.

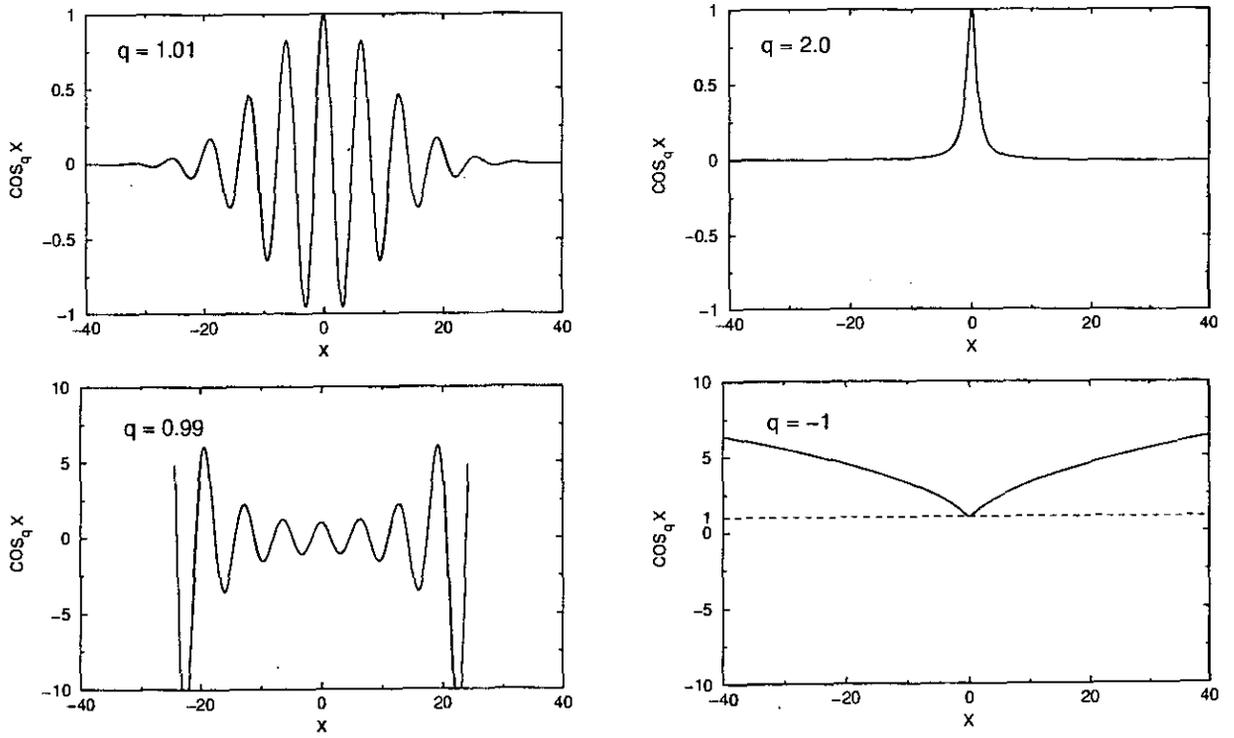


Figura 4.1: $\cos_q x$ para diferentes valores de q .

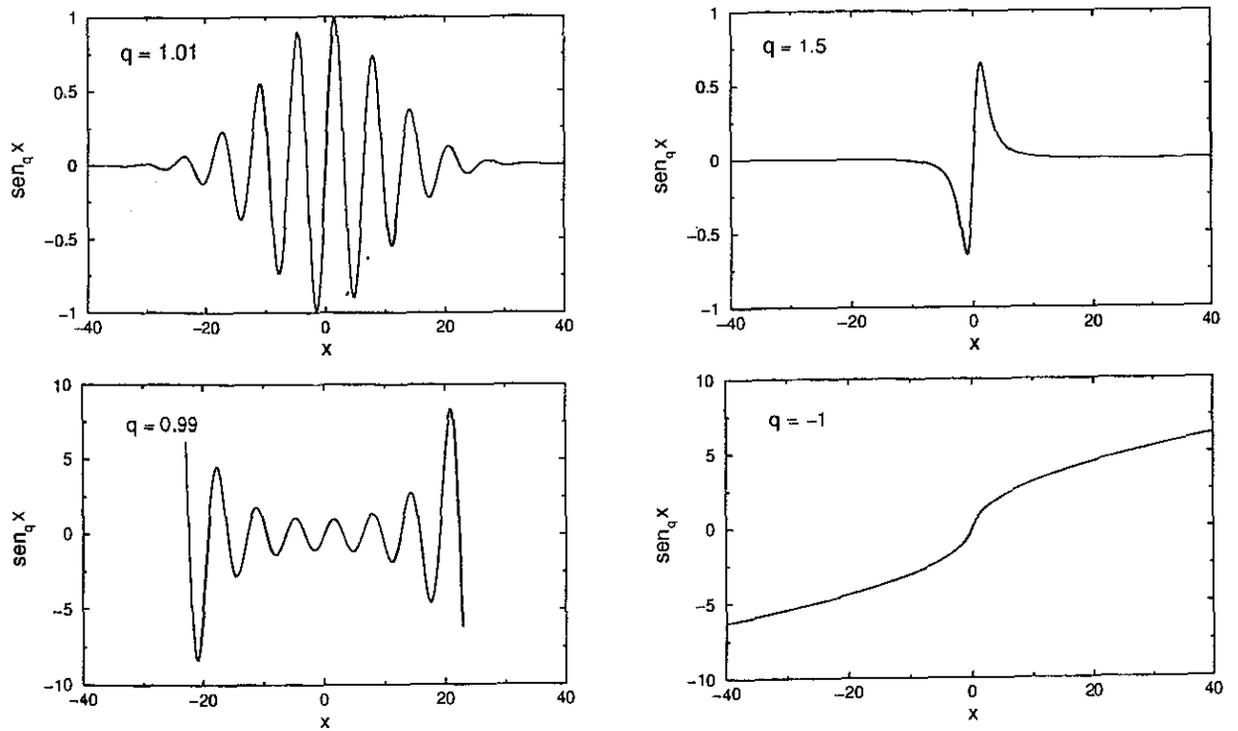


Figura 4.2: $\text{sen}_q x$ para diferentes valores de q .

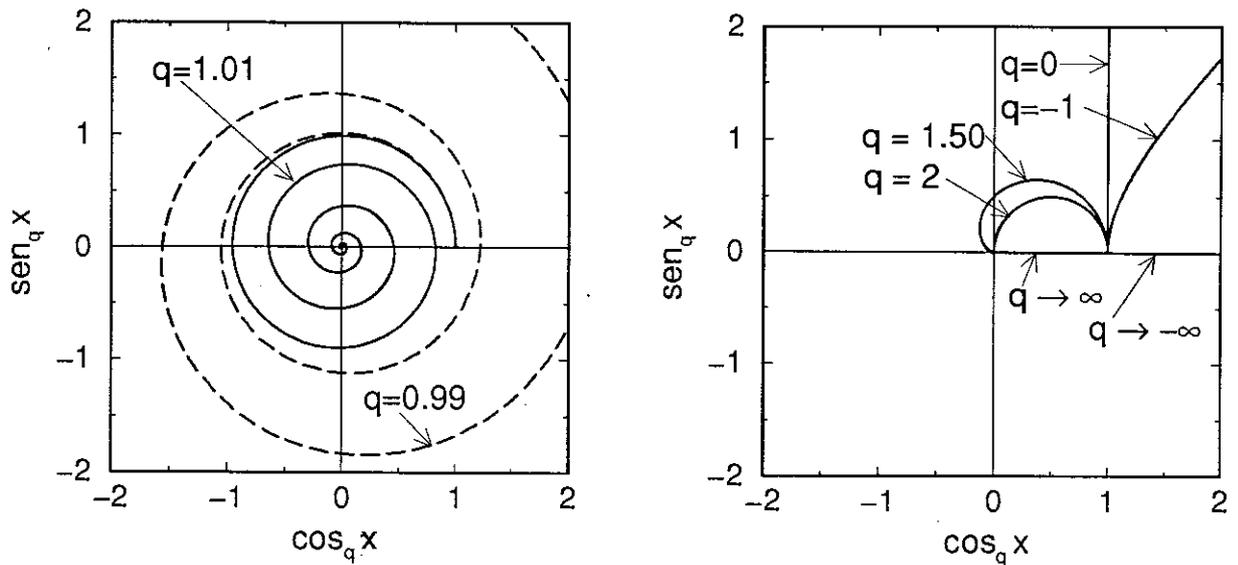


Figura 4.3: Espiral q -trigonométrica, para diferentes valores de q .

De fato, a analogia com as funções circulares usuais é imediata. A abscissa de um ponto t sobre a espiral representa $\cos_q t$, e sua ordenada, $\text{sen}_q t$. O módulo do seu raio vetor é dado por

$$\begin{aligned} \cos_q^2 t + \text{sen}_q^2 t &= \exp_q(it) \exp_q(-it) \\ &= \rho_q^2(t), \end{aligned} \quad (4.16)$$

que é a generalização do teorema de Pitágoras. O número de rotações das espirais é *finito*. Isto é consequência de haver um valor máximo absoluto para $\varphi_q(t)$,

$$\varphi_q^{Max} = \lim_{t \rightarrow \infty} \varphi_q(t) = \frac{\pi}{2} \left| \frac{1}{1-q} \right|, \quad (4.17)$$

de forma que $\cos_q t$ e $\text{sen}_q t$ oscilam indefinidamente apenas para $q = 1$. O número de raízes N_c do q -co-seno é dado por

$$N_c = 2 \left[\text{int} \left(\left| \frac{1}{1-q} \right| \right) - \text{int} \left(\frac{1}{2} \left| \frac{1}{1-q} \right| \right) \right], \quad (4.18)$$

e a do q -seno,

$$N_s = 2 \text{int} \left(\frac{1}{2} \left| \frac{1}{1-q} \right| \right) + 1, \quad (4.19)$$

onde $\text{int}(x)$ representa o maior inteiro $\leq x$. Isto implica que $\cos_q t$ não tem raízes para $q \leq 0$ ou $q \geq 2$; $\text{sen}_q t$ apresenta apenas uma raiz ($t = 0$) para $q \leq 1/2$ ou $q \geq 3/2$. Dentro destas faixas, $\cos_q t$ e $\text{sen}_q t$ apresentam um número finito de raízes (número infinito apenas para $q = 1$).

As raízes de $\cos_q x$ e $\text{sen}_q x$ são aquelas do fator oscilante nas Equações (4.4) e (4.5). Assim encontramos que as raízes de $\cos_q x$ são

$$x_{\pm n} = \pm \frac{\tan_1 \left[(1-q) \frac{\pi}{2} (2n-1) \right]}{1-q}, \quad n = 1, 2, \dots, \frac{N_c}{2}, \quad (4.20)$$

e as raízes de $\text{sen}_q x$ são

$$x_{\pm n} = \pm \frac{\tan_1 \left[(1-q) n \pi \right]}{1-q}, \quad n = 1, 2, \dots, \frac{N_s-1}{2}. \quad (4.21)$$

A diferença entre duas raízes vizinhas, $\Delta x_k = x_k - x_{k-1}$, é encontrada considerando que $\varphi_q(x_k) - \varphi_q(x_{k-1}) = \pi$. Considerando ainda a relação para de arcos-tangentes usuais,

$$\arctan_1 x \pm \arctan_1 y = \arctan_1 \left(\frac{x \pm y}{1 \mp xy} \right), \quad (4.22)$$

encontramos¹

$$\Delta x_k = \frac{[1 + (1-q)^2 x_k x_{k-1}] \tan_1[(1-q)\pi]}{1-q}, \quad (4.23)$$

com $\lim_{q \rightarrow 1} \Delta x_k = \pi$.

$Q_n(q)$, na Equação (2.33), é um polinômio em q de grau n , com raízes $\{0, 1/2, 2/3, \dots, (n-1)/n\}$. Assim, se q assume um desses valores, $\exp_q x$, $\cos_q x$ e $\text{sen}_q x$ apresentam formas polinomiais. Isso também pode ser visto, fazendo uso das identidades (vide, p. ex., [72, Eq. 4.3.45])

$$\cos_1(\arctan_1 x) = (1+x^2)^{-1/2}, \quad \text{sen}_1(\arctan_1 x) = x(1+x^2)^{-1/2}, \quad (4.24)$$

e também das relações para ângulos duplo das funções circulares, nas Equações (4.8) e (4.9). A Tabela 4.1 apresenta algumas expressões para $\cos_q x$, $\text{sen}_q x$ e $\rho_q^2(x)$, para valores particulares de q .

¹Esta notação para raízes vizinhas, Δx_k , não é adequada para as raízes x_{-1} e x_1 de $\cos_q x$, uma vez que o q -co-seno não tem a raiz x_0 , mas este é um ponto menor, e não invalida a Equação (4.23).

Tabela 4.1: Casos particulares das funções q -trigonométricas

q	$\cos_q x$	$\sin_q x$	$\rho_q^2(x)$
$-\infty$	1	0	1
0	1	x	$1 + x^2$
1/2	$1 - (x/2)^2$	x	$[1 + (x/2)^2]^2$
1	$\cos x$	$\text{sen } x$	1
3/2	$\frac{1 - (x/2)^2}{[1 + (x/2)^2]^2}$	$\frac{x}{[1 + (x/2)^2]^2}$	$\frac{1}{[1 + (x/2)^2]^2}$
2	$\frac{1}{1 + x^2}$	$\frac{x}{1 + x^2}$	$\frac{1}{1 + x^2}$
∞	1	0	1

Podemos facilmente verificar que $\phi(x) = \exp_q(ikx)$ é solução da seguinte equação diferencial não-linear

$$\frac{d^2[\phi(x)]^\nu}{dx^2} + \gamma^2[\phi(x)]^\mu = 0, \quad (4.25)$$

com

$$q = \frac{\mu - \nu}{2} + 1 \quad (4.26)$$

e

$$k^2 = \frac{2\gamma^2}{\nu(\mu + \nu)}. \quad (4.27)$$

A Equação (4.25) é uma possível forma de oscilador não-linear. Notemos que $\cos_q x$ e $\text{sen}_q x$, tomados individualmente, não são soluções da Equação (4.25), mas apenas se combinados na forma da Equação (4.3).

As derivadas do q -co-seno e do q -seno podem ser obtidas das Equações (4.4) e (4.5), como também das Equações (4.8) e (4.9), mas podem ser expressas de uma forma mais simples quando consideramos as Equações (2.29) e (4.3):

$$\frac{d}{dx} \cos_q x = \operatorname{Re} [i(\cos_q x + i \operatorname{sen}_q x)^q], \quad (4.28)$$

$$\frac{d}{dx} \operatorname{sen}_q x = \operatorname{Im} [i(\cos_q x + i \operatorname{sen}_q x)^q]. \quad (4.29)$$

Recapitulando a Equação (2.28) com $x \rightarrow ix$, temos

$$(\cos_q x \pm i \operatorname{sen}_q x)^a = \cos_{1-(1-q)/a}(ax) \pm i \operatorname{sen}_{1-(1-q)/a}(ax) \quad (4.30)$$

que representa uma generalização do Teorema De Moivre [72]. As Equações (4.28) e (4.29) ficam dadas por

$$\frac{d}{dx} \cos_q x = -\operatorname{sen}_{2-1/q}(qx), \quad (4.31)$$

$$\frac{d}{dx} \operatorname{sen}_q x = \cos_{2-1/q}(qx). \quad (4.32)$$

Outra maneira bastante simples e compacta de expressar as derivadas das funções q -trigonométricas é através do operador $D_{(q)}$ (Equação (2.63)):

$$D_{(q)} \cos_q x = -\operatorname{sen}_q x, \quad (4.33)$$

$$D_{(q)} \operatorname{sen}_q x = \cos_q x. \quad (4.34)$$

Com este operador, temos outra generalização do oscilador harmônico, em alternativa à Equação (4.25):

$$D_{(q)}^2 \phi(x) + k^2 \phi(x) = 0. \quad (4.35)$$

Neste caso, as funções $\exp_q(ikx)$, $\cos_q(kx)$ e $\operatorname{sen}_q(kx)$ são, individualmente, soluções de (4.35).

4.2 Forma geral da Fórmula de Euler generalizada

A versão q da fórmula de Euler, Equação (4.3), está escrita para um número imaginário ix . Vamos expressá-la a seguir para um número complexo $z = x + iy$, e faremos isso de dois modos alternativos, Equações (4.36) e (4.38). Inicialmente façamos a transformação $y \rightarrow iy$ na Equação (2.24), obtendo

$$\exp_q z = \exp_q x \left\{ \cos_q \left[\frac{y}{1 + (1 - q)x} \right] + i \operatorname{sen}_q \left[\frac{y}{1 + (1 - q)x} \right] \right\} \\ (\forall x \neq \frac{1}{q-1}, [1 + (1 - q)x] > 0). \quad (4.36)$$

Consideremos agora outra forma da versão q da fórmula de Euler para um número complexo. Para tanto, vamos introduzir a função²

$$\zeta_q \equiv \ln_1 \exp_q z. \quad (4.37)$$

Se tomarmos a exponencial de ambos os lados desta equação podemos expressar a fórmula generalizada de Euler para um número complexo z como

$$\exp_q z = \exp_1 \chi_q (\cos_1 \psi_q + i \operatorname{sen}_1 \psi_q), \quad (4.38)$$

onde χ_q e ψ_q são a parte real e a parte imaginária, respectivamente, de ζ_q ,

$$\zeta_q = \chi_q + i\psi_q, \quad (4.39)$$

com

$$\chi_q \equiv \frac{\ln_1 |\omega_q|}{1 - q} \quad (4.40)$$

e

$$\psi_q \equiv \frac{\arg(\omega_q)}{1 - q} \quad (-\pi < (1 - q)\psi_q \leq \pi). \quad (4.41)$$

²Algumas das curiosas propriedades da função ζ_q foram percebidas independente e recentemente na Ref. [76].

Temos também que

$$\omega_q = \alpha_q + i\beta_q, \quad (4.42)$$

com

$$\alpha_q = [1 + (1 - q)x], \quad (4.43)$$

$$\beta_q = (1 - q)y. \quad (4.44)$$

Notemos que

$$\lim_{q \rightarrow 1} \zeta_q = z, \quad (4.45)$$

$$\lim_{q \rightarrow 1} \chi_q = x, \quad (4.46)$$

$$\lim_{q \rightarrow 1} \psi_q = y. \quad (4.47)$$

A Equação (4.47) é definida apenas se ω_q estiver no primeiro ou quarto quadrantes do plano complexo. Para evitarmos que ω_q fique no segundo ou terceiro quadrantes durante o processo de limite $q \rightarrow 1$, devemos impor $\alpha_q > 0$ (esta condição é a mesma dada por (4.6), e também a mesma restrição da Equação (4.36)). Isto significa que a única restrição imposta na Equação (4.47), quando $q \rightarrow 1$, é que x deve permanecer finito.

A relação entre x e χ_q , Equação (4.40), para um número real ($y = 0$) é a mesma que aquela entre a q -entropia não-extensiva e a entropia de Rényi (Equação (1.26)). Observe-mos ainda que a função ζ_q satisfaz a propriedade de igualdade,

$$z_1 = z_2 \iff \zeta_q(z_1) = \zeta_q(z_2), \quad (4.48)$$

a relação de conjugação complexa

$$\zeta_q(z^*) = \zeta_q^*(z), \quad (4.49)$$

e as condições de analiticidade de Cauchy-Riemann (vide, p. ex., [90],[98])

$$\frac{\partial \chi_q}{\partial x} = \frac{\partial \psi_q}{\partial y}, \quad \frac{\partial \chi_q}{\partial y} = -\frac{\partial \psi_q}{\partial x}. \quad (4.50)$$

Satisfaz também a relação

$$\begin{aligned}\zeta_q(z_1) + \zeta_q(z_2) &= \zeta_q(z_1 \oplus_q z_2) \\ &= \zeta_q(z_1 + z_2 + (1 - q)z_1 z_2).\end{aligned}\tag{4.51}$$

Como estávamos dizendo, as Equações (4.36) e (4.38) são duas formas alternativas e equivalentes para expressar a q -exponencial de um número complexo. Igualemos uma a outra, o que resulta

$$\exp_q x \cos_q \left[\frac{y}{1 + (1 - q)x} \right] = \exp_1 \chi_q \cos_1 \psi_q,\tag{4.52}$$

$$\exp_q x \operatorname{sen}_q \left[\frac{y}{1 + (1 - q)x} \right] = \exp_1 \chi_q \operatorname{sen}_1 \psi_q.\tag{4.53}$$

Dividindo a última pela anterior, temos

$$\tan_q \left[\frac{y}{1 + (1 - q)x} \right] = \tan_1 \psi_q.\tag{4.54}$$

Notemos que $|\omega_q|^2 = [1 + (1 - q)z][1 + (1 - q)z^*]$, do que segue

$$\exp_1 \chi_q = (\exp_q z \exp_q z^*)^{1/2}.\tag{4.55}$$

As Equações (4.8), (4.9), (4.13) são casos particulares das Equações (4.52), (4.53), (4.54), respectivamente, para um número imaginário puro iy . $\exp_1 \chi_q / \exp_q x$ é a forma geral de ρ_q (notemos a analogia entre a Eq. (4.55) e a Eq. (4.10), $\rho_q(x) = [\exp_q(ix) \exp_q(-ix)]^{1/2}$), e ψ_q é a forma geral de φ_q .

A comparação da Equação (4.38) com a fórmula de Euler usual, $e_1^z = e_1^x (\cos_1 y + i \operatorname{sen}_1 y)$ nos traz um comentário interessante. Ambos e_1^z e e_q^z podem ser fatorados em dois termos, um responsável pela amplitude e outro responsável pelas oscilações. No caso das funções usuais ($q = 1$), as partes real e imaginária de um número complexo estão desacopladas, por assim dizer, enquanto $q \neq 1$ introduz uma espécie de acoplamento entre x e y , e ambos os fatores de amplitude e oscilação dependem de ambas partes real e imaginária de z .

Concluimos esta Seção apresentando as expressões de produtos das funções q -trigonométricas:

$$2 \cos_q x \cos_q y = \exp_1[\chi_q(ix) + \chi_q(iy)] \times \\ \{ \cos_1[\psi_q(ix) - \psi_q(iy)] + \cos_1[\psi_q(ix) + \psi_q(iy)] \} \quad (4.56)$$

$$= \exp_q[(1-q)xy] \cos_q \left[\frac{x-y}{1+(1-q)^2xy} \right] \\ + \exp_q[-(1-q)xy] \cos_q \left[\frac{x+y}{1-(1-q)^2xy} \right], \quad (4.57)$$

$$2 \operatorname{sen}_q x \operatorname{sen}_q y = \exp_1[\chi_q(ix) + \chi_q(iy)] \times \\ \{ \cos_1[\psi_q(ix) - \psi_q(iy)] - \cos_1[\psi_q(ix) + \psi_q(iy)] \} \quad (4.58)$$

$$= \exp_q[(1-q)xy] \cos_q \left[\frac{x-y}{1+(1-q)^2xy} \right] \\ - \exp_q[-(1-q)xy] \cos_q \left[\frac{x+y}{1-(1-q)^2xy} \right], \quad (4.59)$$

$$2 \operatorname{sen}_q x \cos_q y = \exp_1[\chi_q(ix) + \chi_q(iy)] \times \\ \{ \operatorname{sen}_1[\psi_q(ix) - \psi_q(iy)] + \operatorname{sen}_1[\psi_q(ix) + \psi_q(iy)] \} \quad (4.60)$$

$$= \exp_q[(1-q)xy] \operatorname{sen}_q \left[\frac{x-y}{1+(1-q)^2xy} \right] \\ + \exp_q[-(1-q)xy] \operatorname{sen}_q \left[\frac{x+y}{1-(1-q)^2xy} \right]. \quad (4.61)$$

Estas últimas Equações (4.56)–(4.61) são válidas desde que $xy \neq |1-q|^{-2}$.

4.3 Funções q -hiperbólicas

É imediata e natural a extensão desta q -deformação para as funções hiperbólicas. Temos as definições

$$\cosh_q x \equiv \frac{\exp_q(x) + \exp_q(-x)}{2}, \quad (4.62)$$

$$\operatorname{senh}_q x \equiv \frac{\exp_q(x) - \exp_q(-x)}{2}, \quad (4.63)$$

$$\tanh_q x \equiv \frac{\sinh_q x}{\cosh_q x}. \quad (4.64)$$

Segue-se que

$$\begin{aligned} \cosh_q^2 x + \sinh_q^2 x &= \exp_q(x) \exp_q(-x) \\ &= \exp_q[-(1-q)x^2]. \end{aligned} \quad (4.65)$$

O Teorema De Moivre para funções q -hiperbólicas fica dado por

$$(\cosh_q x + \sinh_q x)^a = \cosh_{1-(1-q)/a}(ax) + \sinh_{1-(1-q)/a}(ax), \quad (4.66)$$

e as derivadas são

$$\frac{d}{dx} \cosh_q x = \sinh_{2-1/q}(qx), \quad (4.67)$$

$$\frac{d}{dx} \sinh_q x = \cosh_{2-1/q}(qx). \quad (4.68)$$

A q -tangente hiperbólica apresenta simetria do tipo $(1-q) \leftrightarrow (q-1)$, i.e.,

$$\tanh_q x = \tanh_{2-q} x. \quad (4.69)$$

A Figura 4.3 ilustra o comportamento de $\tanh_q x$.

Relações entre funções circulares usuais e hiperbólicas são obtidas pela definição destas funções com argumentos complexos. Aqui vamos proceder da mesma forma:

$$\cos_q z \equiv \frac{\exp_q(iz) + \exp_q(-iz)}{2}, \quad (4.70)$$

$$\sen_q z \equiv \frac{\exp_q(iz) - \exp_q(-iz)}{2i}, \quad (4.71)$$

e

$$\cosh_q z \equiv \frac{\exp_q(z) + \exp_q(-z)}{2}, \quad (4.72)$$

$$\sinh_q z \equiv \frac{\exp_q(z) - \exp_q(-z)}{2}. \quad (4.73)$$

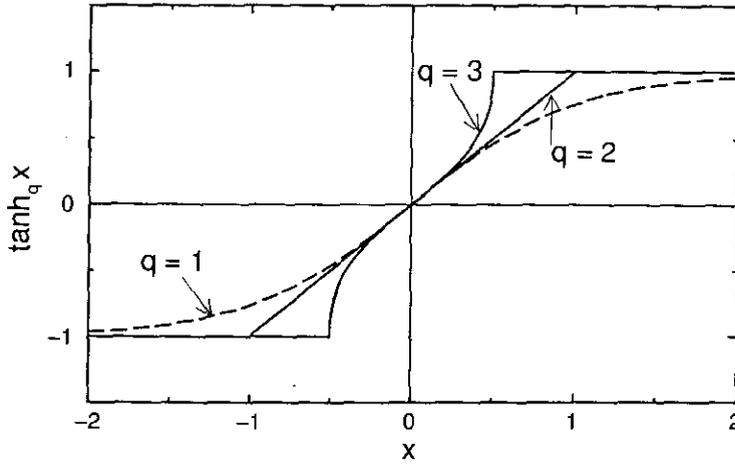


Figura 4.4: Função q -tangente hiperbólica, para diferentes valores de q . Para $q = 2$, $\tanh_2 x = x$, se $|x| < 1 = |1 - q|^{-1}$. $\tanh'_q(0) = 1, \forall q$.

Usando as definições anteriores, é direto encontrarmos as seguintes relações

$$\begin{aligned}
 \cos_q z &= \frac{1}{2} \cosh_q y \left\{ \cos_q \left[\frac{x}{1 - (1 - q)y} \right] + \cos_q \left[\frac{x}{1 + (1 - q)y} \right] \right\} \\
 &\quad - \frac{1}{2} i \sinh_q y \left\{ \sen_q \left[\frac{x}{1 - (1 - q)y} \right] + \sen_q \left[\frac{x}{1 + (1 - q)y} \right] \right\} \\
 &\quad - \frac{1}{2} \sinh_q y \left\{ \cos_q \left[\frac{x}{1 - (1 - q)y} \right] - \cos_q \left[\frac{x}{1 + (1 - q)y} \right] \right\} \\
 &\quad + \frac{1}{2} i \cosh_q y \left\{ \sen_q \left[\frac{x}{1 - (1 - q)y} \right] - \sen_q \left[\frac{x}{1 + (1 - q)y} \right] \right\}, \quad (4.74)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \sen_q z &= \frac{1}{2} \cosh_q y \left\{ \sen_q \left[\frac{x}{1 - (1 - q)y} \right] + \sen_q \left[\frac{x}{1 + (1 - q)y} \right] \right\} \\
 &\quad + \frac{1}{2} i \sinh_q y \left\{ \cos_q \left[\frac{x}{1 - (1 - q)y} \right] + \cos_q \left[\frac{x}{1 + (1 - q)y} \right] \right\} \\
 &\quad - \frac{1}{2} \sinh_q y \left\{ \sen_q \left[\frac{x}{1 - (1 - q)y} \right] - \sen_q \left[\frac{x}{1 + (1 - q)y} \right] \right\} \\
 &\quad - \frac{1}{2} i \cosh_q y \left\{ \cos_q \left[\frac{x}{1 - (1 - q)y} \right] - \cos_q \left[\frac{x}{1 + (1 - q)y} \right] \right\}, \quad (4.75)
 \end{aligned}$$

com $y \neq |1 - q|^{-1}$, e

$$\cosh_q z = \frac{1}{2} \cosh_q x \left\{ \cos_q \left[\frac{y}{1 - (1 - q)x} \right] + \cos_q \left[\frac{y}{1 + (1 - q)x} \right] \right\}$$

$$\begin{aligned}
& +\frac{1}{2}i \operatorname{senh}_q x \left\{ \operatorname{sen}_q \left[\frac{y}{1-(1-q)x} \right] + \operatorname{sen}_q \left[\frac{y}{1+(1-q)x} \right] \right\} \\
& -\frac{1}{2} \operatorname{senh}_q x \left\{ \operatorname{cos}_q \left[\frac{y}{1-(1-q)x} \right] - \operatorname{cos}_q \left[\frac{y}{1+(1-q)x} \right] \right\} \\
& -\frac{1}{2}i \operatorname{cosh}_q x \left\{ \operatorname{sen}_q \left[\frac{y}{1-(1-q)x} \right] - \operatorname{sen}_q \left[\frac{y}{1+(1-q)x} \right] \right\}, \tag{4.76}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\operatorname{senh}_q z &= \frac{1}{2} \operatorname{senh}_q x \left\{ \operatorname{cos}_q \left[\frac{y}{1-(1-q)x} \right] + \operatorname{cos}_q \left[\frac{y}{1+(1-q)x} \right] \right\} \\
& +\frac{1}{2}i \operatorname{cosh}_q x \left\{ \operatorname{sen}_q \left[\frac{y}{1-(1-q)x} \right] + \operatorname{sen}_q \left[\frac{y}{1+(1-q)x} \right] \right\} \\
& -\frac{1}{2} \operatorname{cosh}_q x \left\{ \operatorname{cos}_q \left[\frac{y}{1-(1-q)x} \right] - \operatorname{cos}_q \left[\frac{y}{1+(1-q)x} \right] \right\} \\
& -\frac{1}{2}i \operatorname{senh}_q x \left\{ \operatorname{sen}_q \left[\frac{y}{1-(1-q)x} \right] - \operatorname{sen}_q \left[\frac{y}{1+(1-q)x} \right] \right\}, \tag{4.77}
\end{aligned}$$

com $x \neq |1-q|^{-1}$. Esta extensão ao domínio complexo das funções q -trigonométricas e q -hiperbólicas satisfazem

$$(\operatorname{cos}_q z)^* = \operatorname{cos}_q z^*, \quad (\operatorname{sen}_q z)^* = \operatorname{sen}_q z^*, \tag{4.78}$$

$$(\operatorname{cosh}_q z)^* = \operatorname{cosh}_q z^*, \quad (\operatorname{senh}_q z)^* = \operatorname{senh}_q z^*. \tag{4.79}$$

O Teorema de Pitágoras para as funções q -trigonométricas com argumentos complexos fica

$$\begin{aligned}
\operatorname{cos}_q^2 z + \operatorname{sen}_q^2 z &= \exp_q(iz) \exp_q(-iz) \\
&= \exp_1[\zeta_q(iz) + \zeta_q(-iz)], \tag{4.80}
\end{aligned}$$

e a Equação (4.65) para argumentos complexos fica

$$\begin{aligned}
\operatorname{cosh}_q^2 z + \operatorname{senh}_q^2 z &= \exp_q(z) \exp_q(-z) \\
&= \exp_1[\zeta_q(z) + \zeta_q(-z)]. \tag{4.81}
\end{aligned}$$

Para concluir este Capítulo, fazemos referência a recentes medidas experimentais de momentos magnéticos da manganita $\text{La}_{0.60}\text{Y}_{0.07}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ [99], com resultados razoavelmente bem descritos (dentro das faixas de erro experimentais) pela mecânica estatística não-extensiva, fazendo uso da q -co-tangente hiperbólica. Considerando um spin clássico $\vec{\mu}$ sujeito a um campo magnético homogêneo \vec{H} , o Hamiltoniano é dado por $\mathcal{H} = -\mu H \cos \theta$, sendo θ o ângulo entre $\vec{\mu}$ e \vec{H} . A magnetização \mathcal{M}_q , dentro do formalismo não-extensivo com q -valores esperados normalizados, Equação (1.28), é dada por [99, Eq. (5)]:

$$\mathcal{M}_q = \frac{\text{Tr}\{\hat{\mu}\hat{\rho}^q\}}{\text{Tr}\{\hat{\rho}^q\}}, \quad (4.82)$$

($\hat{\rho}$ é o operador densidade de probabilidade) de onde decorre a seguinte função, expressa em termos de $\text{coth}_q x$:

$$\frac{\mathcal{M}_q}{\mu} = \frac{1}{2-q} \times \begin{cases} 1 - \frac{1}{x}, & x > \frac{1}{1-q} \\ \text{coth}_q(x) - \frac{1}{x}, & x < \frac{1}{1-q} \end{cases} \quad (4.83)$$

sendo $x = \mu H/k_B T$. Os autores encontraram variações do índice entrópico q em função da temperatura. As medidas foram tomadas acima do ponto crítico ($T_c = 150 \text{ K}$), variando entre 175 e 290 K (vide Eq. (7) e Fig.s 10 e 11 da Ref. [99]).

Capítulo 5

q -Wavelets

Neste Capítulo estendemos o uso das funções q -exponenciais à análise de *wavelets*¹ de algumas wavelets-mãe largamente utilizadas [100]. Particularmente generalizamos a função chapéu mexicano (5.2) e a função Gaussiana modulada (5.3). Além disso, introduzimos também as funções q -trigonométricas, previamente apresentadas, no contexto da análise de wavelets (Seção 5.4).

A literatura sobre wavelets é vasta e dedicada a vários níveis de abordagem ou aprofundamento. Citamos algumas referências básicas, que podem ser úteis ao leitor que queira, seja uma noção mais geral, seja uma noção mais aprofundada: [101, 102, 103, 104, 105, 106, 107, 108, 109, 110].

Relações entre wavelets e a mecânica estatística não-extensiva têm sido abordadas, incluindo aplicações em biofísica, como análise de sinais de eletro-encefalogramas. Fazemos referências a algumas: [111, 112, 113, 114, 115, 116].

¹A denominação em inglês, *wavelets*, é muito popular, embora seja uma versão do francês *ondelletes* [101], que é o termo original. No nosso idioma têm sido tentadas as denominações *ondinhas*, *ondeletas*, ou *ondaletas* [102]. Na hipótese de verter ao português, eu sugeriria *ondinas*, termo que pode expressar a idéia com muito mais charme e sem necessidade dos neologismos anteriores. Entretanto utilizamos o termo inglês, em concordância com as observações do prefácio da Ref. [103]. O termo *wavelet* se refere à função núcleo da transformada; já a estrutura teórica que envolve a transformada e o processamento de sinais pode ser denominada análise de wavelets, ou simplesmente análise wavelet.

5.1 Transformadas de Fourier, Fourier com janelas e wavelets

Nesta Seção apresentamos em linhas gerais e de forma sucinta, elementos da análise de wavelets. Seu conteúdo não pretende ser original ou trazer nada de novo ou fundamental. O objetivo aqui é localizar onde se insere nossa contribuição, desenvolvida nas Seções seguintes. O material da presente Seção pode ser encontrado em várias referências. Particularmente, consultamos mais de perto as Ref. [103, 106, 109].

É difícil superestimar a importância que a análise de Fourier tem para a ciência e a engenharia. O problema original do aquecimento [117] introduziu uma avanço notável nos métodos de análise e se tornou um marco destacado em matemática pura e aplicada. A análise de Fourier é tão esteticamente bela e tão poderosa que se tornou um paradigma da cultura científica. Apenas para citar um exemplo, a revista *Computing in Science and Engineering Magazine* [118], uma publicação conjunta da *IEEE Computer Society* e do *American Institute of Physics*, elegeram a transformada rápida de Fourier, desenvolvida por Cooley e Tukey [119] em 1965, um dos 10 algoritmos mais importantes do Século XX.

Consideremos um sinal $f(t)$, cuja transformada de Fourier é definida por

$$\hat{f}(\omega) \equiv \mathcal{F}[f(t)](\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi i \omega t} f(t) dt. \quad (5.1)$$

$\hat{f}(\omega)$ diz quais freqüências estão presentes em $f(t)$. Existe uma relação biunívoca entre $f(t)$ e $\hat{f}(\omega)$: sua inversa é dada por

$$f(t) = \mathcal{F}^{-1}[\hat{f}(\omega)](t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{2\pi i \omega t} \hat{f}(\omega) d\omega. \quad (5.2)$$

A transformada discreta de Fourier de um sinal amostrado em N instantes de tempo $(0, 1, \dots, N-1)$ igualmente espaçados é obtida utilizando o conjunto de funções $\{e^{2\pi i n \omega}, n = 0, 1, \dots, N-1\}$, tendo, portanto, N valores discretos de freqüências.

A idéia básica por trás da análise de um sinal (temporal ou espacial) pela transformada de Fourier é *similaridade*. Por exemplo, o produto interno $\langle \phi_n, f \rangle$ expressa quão similares

são a função $f(t)$ e o n -ésimo elemento da base, $\phi_n(t)$ (o núcleo da transformada). O núcleo da transformada de Fourier é uma onda plana, e aqui reside sua simplicidade, mas também sua limitação. Rigorosamente falando, uma onda plana estaria em todos os lugares do universo e em todos os tempos (passados e futuros), portanto não existem ondas planas na natureza. Todos os sinais físicos são limitados temporalmente e espacialmente. Como consequência de seu núcleo infinitamente estendido, a transformada de Fourier é incapaz de determinar satisfatoriamente, p. ex., quando um pulso ocorreu, ou onde as bordas de uma imagem estão localizadas (isto é conhecido como fenômeno de Gibbs, vide, p. ex., [71, 120]).

A primeira tentativa de superar as limitações da análise de Fourier foi proposta por Gabor [121], que introduziu a transformada de Fourier com janelas, ou transformada de Fourier de tempos curtos. Utiliza-se uma função auxiliar (janela) $g(t)$ de quadrado integrável² para localizar o sinal no tempo. A Figura 5.1 ilustra o seguinte exemplo de função janela [106]:

$$g(u) = \begin{cases} 1 + \cos(\pi u), & -1 \leq u \leq 1, \\ 0, & \text{em outro caso.} \end{cases} \quad (5.3)$$

Definindo a função transladada no tempo em t

$$g_{w,t}(u) = e^{2\pi i \omega u} g(u - t), \quad (5.4)$$

a transformada de Fourier com janelas é definida por

$$\tilde{f}(\omega, t) \equiv \mathcal{S}[f(t)](\omega, t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi i \omega u} g(u - t) f(u) du = \langle g_{w,t}, f \rangle \quad (5.5)$$

(\mathcal{S} está para *Short time Fourier transform*). $\tilde{f}(\omega, t)$ diz quais frequências existem nas vizinhanças de t . Sua inversa é dada por

$$f(t) = \mathcal{S}^{-1}[\tilde{f}(\omega, t)](t) = \frac{1}{\|g\|^2} \iint e^{2\pi i \omega u} g(u - t) \tilde{f}(\omega, t) d\omega dt. \quad (5.6)$$

²Uma função u é dita de quadrado integrável se $u \in L^2(\mathbb{R})$. $L^2(\mathbb{R})$ é um espaço de Hilbert, munido do produto interno $\langle u, v \rangle = \int_{\mathbb{R}} u(x)v(x) dx$, que define a norma $\|u\| = [\int_{\mathbb{R}} |u(x)|^2 dx]^{1/2}$.

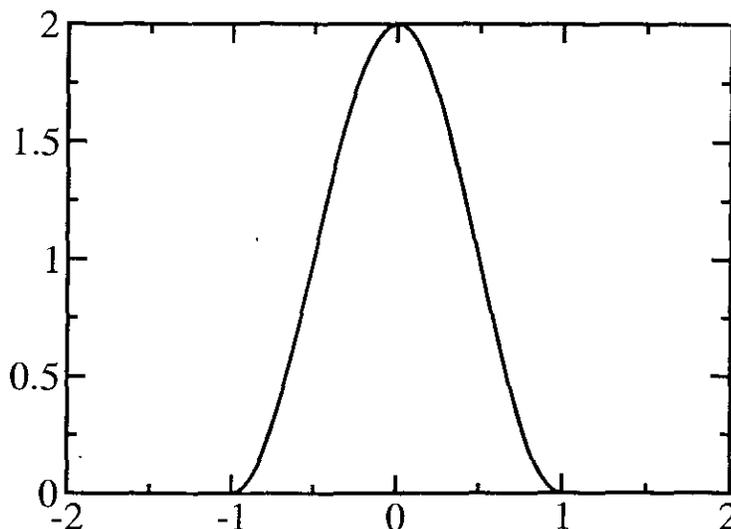


Figura 5.1: Exemplo de função janela, definida pela Equação (5.3).

Da Equação anterior fica evidente a necessidade de g ser de quadrado integrável. Ao usar transformada com janelas, saímos de uma função de uma variável $f(t)$ para outra função de duas variáveis $\tilde{f}(\omega, t)$, portanto temos mais informação que o sinal original, i.e., redundância. Esta transformada leva uma função no domínio do tempo para outra função no domínio tempo-freqüência (diferente da transformada de Fourier, que leva para o domínio da freqüência).

A representação no domínio tempo-freqüência fornece informações importantes sobre o sinal. Consideremos uma janela temporal $g(t)$ e sua associada janela em freqüências $\hat{g}(\omega)$. Se $g(t)$ tiver norma unitária, $\|g\|^2 = 1$, então, pelo teorema de Plancherel, $\|\hat{g}\|^2 = 1$. Os valores médios destas janelas são

$$t_0 = \int_{-\infty}^{\infty} t |g(t)| dt, \quad \omega_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \omega |\hat{g}(\omega)| d\omega. \quad (5.7)$$

Os desvios-padrão T e Ω , em torno de t_0 e ω_0 , respectivamente, são dados por

$$T^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (t - t_0)^2 |g(t)|^2 dt, \quad \Omega^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (\omega - \omega_0)^2 |\hat{g}(\omega)|^2 d\omega. \quad (5.8)$$

T e Ω são relacionados pelo princípio da incerteza (para uma demonstração, vide, p. ex., [109]), que afirma

$$\Omega T \geq \frac{1}{4\pi} \quad (5.9)$$

(a igualdade é obtida com uma janela Gaussiana). Este princípio estabelece que não é possível obter simultaneamente localizações precisas no domínio do tempo e da frequência. Isto é intuitivo, pois para medir uma frequência, é necessário observar o sinal por um intervalo de tempo de, no mínimo, um período. Quanto maior o intervalo de tempo observado, maior a precisão na frequência. A Figura 5.2 ilustra como representar graficamente a localização tempo-frequência.

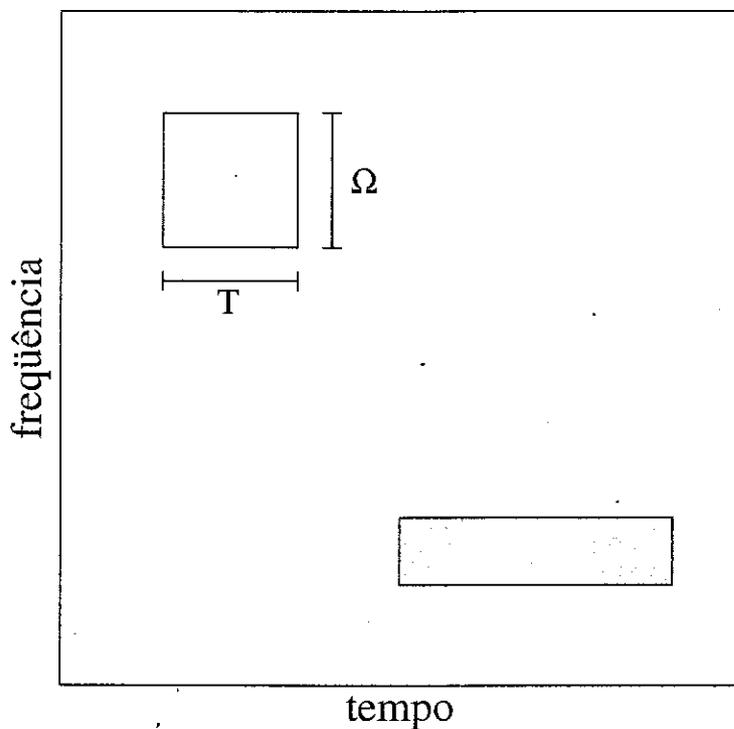


Figura 5.2: Diagrama tempo-frequência. A largura T e a altura Ω de um retângulo (célula de informação) indicam o grau de incerteza nos tempos e frequências, respectivamente. A densidade de frequências $\tilde{f}(\omega, t)$ é indicada por uma escala de cinza. Todas as células têm a mesma área.

A transformada discreta com janelas é feita fixando um tempo t_0 e uma frequência ω_0 , e considerando múltiplos destas quantidades. Isto gera uma família de funções,

$$g_{m,n}(u) = e^{im\omega_0 u} g(u - nt). \quad (5.10)$$

Translações no tempo cobrem todo o sinal. A Figura 5.3 esquematiza o processo de

análise, mostrando o reticulado

$$\Delta_{t_0, \omega_0} = \{(mt_0, n\omega_0); m, n \in \mathbb{Z}\}. \quad (5.11)$$

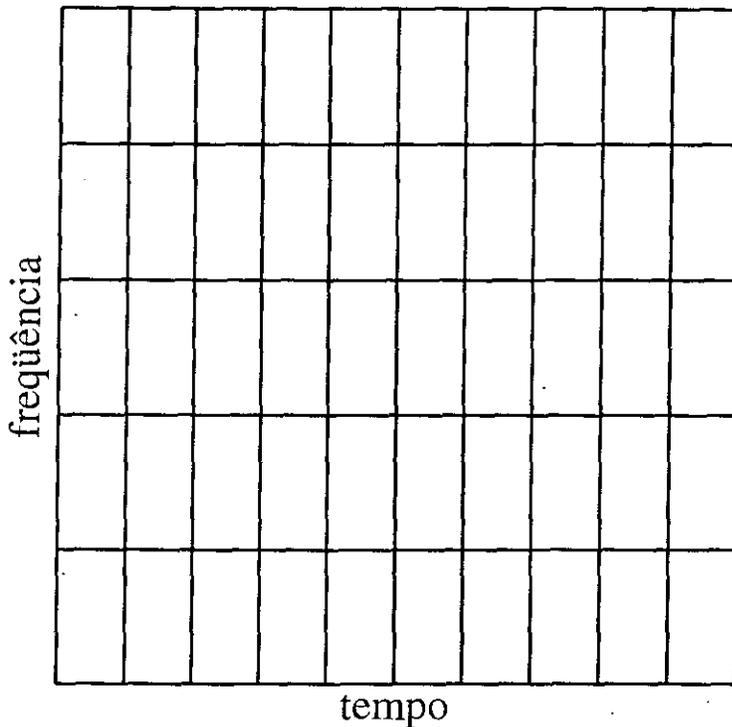


Figura 5.3: Diagrama tempo-frequência para transformada com janelas. O retículo de informação é uniforme.

Um problema ainda persiste com o uso de janelas de escala fixa: detalhes do sinal muito menores que a largura T são detectados, mas não localizados (i.e., não localizados no interior da janela). Eles aparecem no comportamento das frequências da transformada com janelas de uma forma similar que apareceriam na transformada de Fourier usual. Por outro lado, características do sinal bastante mais duradouras que T aparecem no comportamento *temporal* da transformada de Fourier com janela, i.e., não são detectados.

Para evitar este problema, é necessário uma transformada que seja independente da escala. A análise wavelet foi desenvolvida para cumprir este objetivo.

Consideremos uma função $\varphi(t) \in L^2(\mathbb{R})$, e geremos uma família de funções variando a escala. Para tanto, fixemos um valor arbitrário $p \geq 0$ para todo $s \neq 0$ ($s \in \mathbb{R}$) e definamos

$$\varphi_s(u) = |s|^{-p} \varphi\left(\frac{u}{s}\right). \quad (5.12)$$

Observemos o fator $\varphi(u/s)$, que compõe a Equação anterior. Se $s > 1$, esta função promove dilatações por um fator s ao longo do eixo das abscissas. Se $0 < s < 1$, φ_s sofre uma compressão nesta direção. $s = -1$ corresponde a uma reflexão de φ_s e, consistentemente, $s < -1$ e $-1 < s < 0$ correspondem a dilatações e compressões refletidas, respectivamente, da função original. s é denominado *fator de escala*. O fator $|s|^{-p}$ que aparece na Equação (5.12) exerce um papel similar ao longo do eixo das ordenadas. Para $p > 0$, quando φ_s é dilatada na direção horizontal, ela é comprimida na direção vertical, e vice-versa. Quando $p < 0$, ocorrem dilatações (ou compressões) simultâneas em ambas as direções. O valor de p é irrelevante para a análise wavelet [106], mas usualmente são utilizados apenas valores positivos. O valor mais comum em uso entre os praticantes da análise wavelet é $p = 1/2$. A Figura 5.4 ilustra as dilatações e contrações de uma função wavelet.

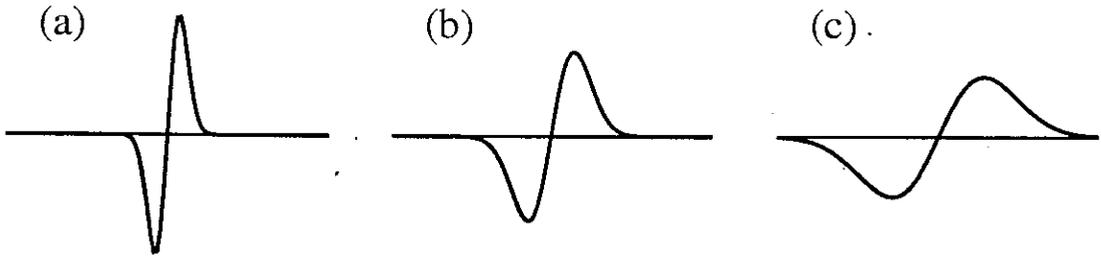


Figura 5.4: Dilatações e contrações de $\varphi_s(u)$, com $\varphi(u) = u e^{-u^2}$ e $p = 1/2$. (a) $s = 1/2$; (b) $s = 1$; (c) $s = 2$.

Deslocamentos no tempo são obtidos definindo, para cada $t \in \mathbb{R}$, a função

$$\varphi_{s,t}(u) = \varphi_s(u - t) = |s|^{-p} \varphi\left(\frac{u - t}{s}\right). \quad (5.13)$$

A transformada de wavelets é definida por

$$\tilde{f}(s, t) = \mathcal{W}[f(u)](s, t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(u) \varphi_{s,t}(u) du = (\varphi_{s,t}, f). \quad (5.14)$$

A transformada inversa é dada por

$$f(u) = \mathcal{W}^{-1}[\tilde{f}(s, t)](u) = \frac{1}{C} \int \int_{\mathbb{R}^2} |s|^{2p-3} \tilde{f}_{s,t}(u) \varphi_{s,t}(u) ds dt, \quad (5.15)$$

sendo

$$C = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\hat{\varphi}(u)|^2}{|u|} du < \infty \quad (5.16)$$

e $\hat{\varphi}(u)$ é a transformada de Fourier de $\varphi(u)$. Similarmente à transformada com janelas, a transformada wavelet também é redundante. A condição (5.16) é chamada condição de admissibilidade. Qualquer função φ que a satisfaça é chamada wavelet, ou melhor, wavelet-mãe, pois a partir dela é possível gerar a família de wavelets escalados e transladados $\{\varphi_{s,t}(u)\}$. Desta condição, segue que

$$\lim_{u \rightarrow 0} \hat{\varphi}(u) = 0. \quad (5.17)$$

Sendo $\varphi(u)$ contínua, $\hat{\varphi}(0) = 0$, o que implica (da Equação (5.1), com $\omega = 0$)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(u) du = 0. \quad (5.18)$$

Esta Equação estabelece que a função φ deve oscilar, mas não indefinidamente, e assim, tem forma de uma pequena onda — uma ondinha, ou *wavelet*.

A versão discreta da análise wavelet é obtida utilizando o chamado retículo diádico, onde as escalas variam por um fator 2. Da Equação (5.13), com $p = 1/2$, $s = 2^m$ e $t = n2^m$ ($m, n \in \mathbb{Z}$), temos

$$\varphi_{m,n}(u) = 2^{-m/2} \varphi(2^{-m}u - n). \quad (5.19)$$

Fixados uma frequência de referência ω_0 e um tempo de referência t_0 , o reticulado no domínio tempo-frequência, ilustrado na Figura 5.5, é dado por [103]

$$\Delta_{2\omega_0, t_0} = \{(2^{-m}\omega_0, n2^m t_0); m, n \in \mathbb{Z}\}. \quad (5.20)$$

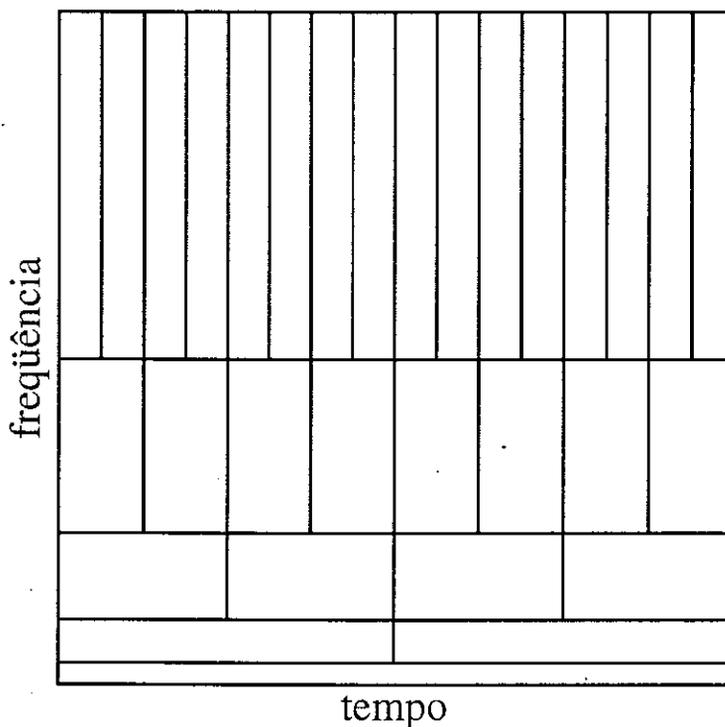


Figura 5.5: Diagrama tempo-frequência para transformada wavelet. Baixas frequências requerem longos intervalos de tempo para serem detectadas (baixa localização temporal e alta localização em frequências); altas frequências requerem pequenos intervalos de tempo (alta localização temporal e baixa localização em frequências).

A transformada de Fourier com janelas utiliza janelas de tamanho fixo e as preenche com oscilações de diferentes frequências (conseqüentemente, o número de oscilações dentro de cada janela varia). A transformada wavelet utiliza funções com número fixo de oscilações (as funções wavelet) e varia as dimensões das janelas. Este procedimento usa automaticamente janelas estreitas para identificar componentes de alta frequência do sinal, e janelas largas para os componentes de baixa frequência.

Nossa contribuição, e o restante deste Capítulo é dedicado a isto, se restringe à proposta de generalização de duas wavelets-mãe largamente utilizadas, o chapéu mexicano e a Gaussiana modulada, e também a introdução de novas wavelets-mãe, derivadas das funções q -trigonométricas tratadas no Capítulo 4.

5.2 q -Chapéu mexicano

Um exemplo simples e comum de wavelet é o chapéu mexicano (veja, p. ex., Ref. [122, 104, 110]), que é gerado a partir da distribuição Gaussiana:

$$\begin{aligned}\psi(x) &= -A \frac{d^2 e_1^{-x^2/2}}{dx^2}, \\ &= A (1 - x^2) e_1^{-x^2/2}.\end{aligned}\tag{5.21}$$

A constante A é dada pela condição de normalização

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1,\tag{5.22}$$

que origina

$$A = \frac{2}{\pi^{1/4} \sqrt{3}}.\tag{5.23}$$

Distribuições Gaussianas são ubíquitas na natureza e são particularmente relacionadas a processos de difusão normal. São obtidas pela otimização da entropia de Boltzmann-Gibbs (Equação (1.4)), sujeita aos vínculos de normalização e finitude do segundo momento (x^2). Processos de difusão anômala, tais como vôos de Lévy, também são muito freqüentes na natureza, mas não são descritos pelo formalismo de Boltzmann-Gibbs. Foi recentemente mostrado [43, 44] que sua fundamentação repousa na entropia não-extensiva e no teorema central do limite de Lévy-Gnedenko. Otimizando S_q , escrita na versão contínua,

$$S_q[p_q(x)] = k \frac{1 - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sigma} [\sigma p_q(x)]^q}{q - 1},\tag{5.24}$$

com o vínculo de normalização, e impondo um valor finito para o q -valor esperado não normalizado de x^2 (veja [44] para a versão normalizada),

$$\langle x^2 \rangle_q \equiv \int dx x^2 [\sigma p_q(x)]^q = \sigma^2\tag{5.25}$$

(com esta definição, o conceito de valor esperado usual se torna um caso particular, $\langle x^2 \rangle_1$), temos

$$p_q(x) = \left\{ \begin{array}{ll} \left[\frac{(q-1)\beta}{\pi} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1} - \frac{1}{2}\right)} e_q^{-\beta x^2}, & 1 < q < 3, \\ \left[\frac{(1-q)\beta}{\pi} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} + \frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} + 1\right)} e_q^{-\beta x^2}, & \text{se } |x| < \sqrt{\frac{1}{(1-q)\beta}}, \\ 0, & \text{em outro caso,} \end{array} \right\} \quad q < 1. \quad (5.26)$$

$p_q(x)$ não é normalizável para $q \geq 3$. Esta equação, $p_q(x) \propto e_q^{-\beta x^2}$, pode ser tomada como uma q -Gaussiana, uma vez que a distribuição Gaussiana usual é recuperada no limite $q \rightarrow 1$. Além disso, para $q = 2$, ela gera a distribuição de Cauchy-Lorentz, $q \rightarrow 3$ gera uma distribuição completamente plana, e para $q \rightarrow -\infty$, ela se torna a delta de Dirac. A q -Gaussiana unifica uma grande variedade de diferentes distribuições numa única família, parametrizada por q .

Para generalizar o chapéu mexicano, a primeira e mais natural idéia que nos vem a mente é tomar a segunda derivada de uma q -Gaussiana. Em vez de fazermos isto, vamos usar

$$\psi_q(x) \propto \frac{d^2 [e_q^{-\beta x^2}]^{2-q}}{dx^2}, \quad (5.27)$$

porque esta opção apresenta um comportamento mais conveniente. De fato, tomar a segunda derivada de $e_q^{-\beta x^2}$ ou $[e_q^{-\beta x^2}]^{2-q}$ são formalmente equivalentes — renomeando convenientemente os parâmetros β e q , podemos passar de uma a outra. Encontramos a expressão para o q -chapéu mexicano:

$$\psi_q(x) = \left\{ \begin{array}{ll} A_q [1 - (3-q)\beta x^2] [e_q^{-\beta x^2}]^q, & 1 < q < 3, \\ A_q [1 - (3-q)\beta x^2] [e_q^{-\beta x^2}]^q, & \text{se } |x| < \sqrt{\frac{1}{(1-q)\beta}}, \\ 0, & \text{em outro caso,} \end{array} \right\} \quad -1 < q < 1. \quad (5.28)$$

Para $q \leq -1$, $\psi_q(x)$ não é normalizável, e para $q \geq 3$, ela não é admissível. A constante de normalização é dada por (vide Apêndice A)

$$A_q = \begin{cases} \frac{\beta^{1/4}}{\pi^{1/4}\sqrt{3}} \left[\frac{(q-1)^{5/2} \Gamma\left(\frac{2q}{q-1}\right)}{\Gamma\left(\frac{2q}{q-1} - \frac{5}{2}\right)} \right]^{1/2}, & 1 < q < 3, \\ \frac{\beta^{1/4}}{\pi^{1/4}\sqrt{3}} \frac{(5-q)^{1/2} (3+q)^{1/2}}{2} \left[\frac{(1-q)^{1/2} \Gamma\left(\frac{2q}{1-q} + \frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{2q}{1-q} + 1\right)} \right]^{1/2}, & -1 < q < 1. \end{cases} \quad (5.29)$$

$\psi_q(x)$ satisfaz a condição de admissibilidade para uma wavelet, Equação (5.18), e consistentemente recupera o chapéu mexicano, $\lim_{q \rightarrow 1} \psi_q(x) = \psi_1(x)$. A faixa de valores admissíveis para q , ($-1 < q < 3$), é dividida em três regiões. Para $1 < q < 3$, $\psi_q(x)$ tem suporte infinito e apresenta uma cauda do tipo lei de potência $\sim -1/|x|^{2/(q-1)}$, que é um contraste marcante com a cauda exponencial do chapéu mexicano original. Quando $q < 1$, $\psi_q(x)$ apresenta o corte em $|x_c| = [(1-q)\beta]^{-1/2}$. Na faixa $0 < q < 1$, $\psi_q(x_c) = 0$, e quando $-1 < q < 0$, $\psi_q(x)$ diverge. Para $q \rightarrow -1$, $\psi_q(x)$ coincide com o eixo das abscissas, exceto nas posições de corte, onde ela diverge. Estas características diferem significativamente da wavelet chapéu mexicano original. A Figura 5.6 ilustra $\psi_q(x)$ com $\beta = 1/2$.

A transformada de Fourier, definida por (adotamos aqui a convenção adotada pela Ref. [85], diferente da Eq. (5.1)).

$$\mathcal{F}[f(x); y] \equiv F(y) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ixy} f(x) dx, \quad (5.30)$$

de $\psi_q(x)$ pode ser encontrada considerando a Equação (5.27), e levando em conta a propriedade da transformada de Fourier de derivadas, $\mathcal{F}[f^{(n)}; y] = (-iy)^n F(y)$, juntamente com a transformada de Fourier de uma q -Gaussiana (vide Apêndice A). Encontramos

$$\mathcal{F}[\psi_q(x); y] = \begin{cases} \frac{A_q}{(2-q)\beta} \frac{1}{\sqrt{2(q-1)\beta} \Gamma\left(\frac{2-q}{q-1}\right)} y^2 \left[\frac{|y|}{2\sqrt{(q-1)\beta}} \right]^{\nu} K_{\nu} \left(\frac{|y|}{\sqrt{(q-1)\beta}} \right), & 1 < q < 3, \\ \frac{A_q}{2(2-q)\beta} \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q} + 1\right)}{\sqrt{2(1-q)\beta}} y^2 \left[\frac{2\sqrt{(1-q)\beta}}{y} \right]^{-\nu} J_{-\nu} \left(\frac{y}{\sqrt{(1-q)\beta}} \right), & -1 < q < 1, \end{cases} \quad (5.31)$$

com $\nu = \frac{2-q}{q-1} - \frac{1}{2}$.

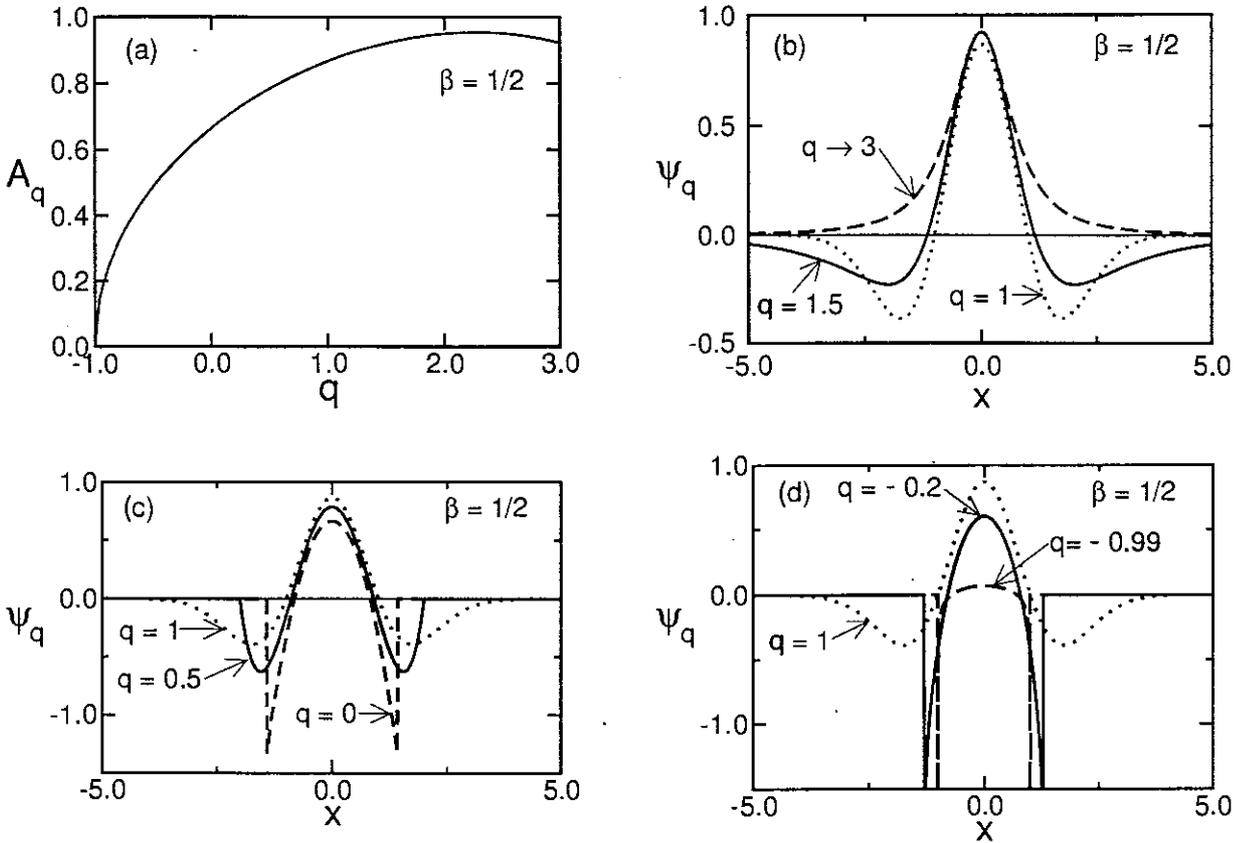


Figura 5.6: q -chapéu mexicano com $\beta = 1/2$. (a) Constante de normalização A_q ; (b) $\psi_q(x)$ para $1 < q < 3$; (c) $0 < q < 1$; (d) $-1 < q < 0$. O chapéu mexicano usual ($q = 1$) é representado em linha pontilhada, para comparação.

É possível ter variações do q -chapéu mexicano usando $\beta = \beta(q)$ (com $\beta(1) = 1/2$), por exemplo $\beta = 1/(3 - q)$. A Figura 5.7 ilustra esta possibilidade (usamos a notação ψ_q^* , para diferenciá-lo do caso representado pela Figura 5.6). Notemos que quando $q < 1$, o comportamento de ambos ψ_q e ψ_q^* são similares; entretanto, para $q > 1$, o comportamento de ambas as wavelets difere significativamente, em consequência da divergência da constante de normalização para o caso $\beta = 1/(3 - q)$. Chamamos ainda a atenção para outras possibilidades: assim como foi feito na Ref. [122], derivadas pares de ordem superior a 2 da q -Gaussiana também originam wavelets.

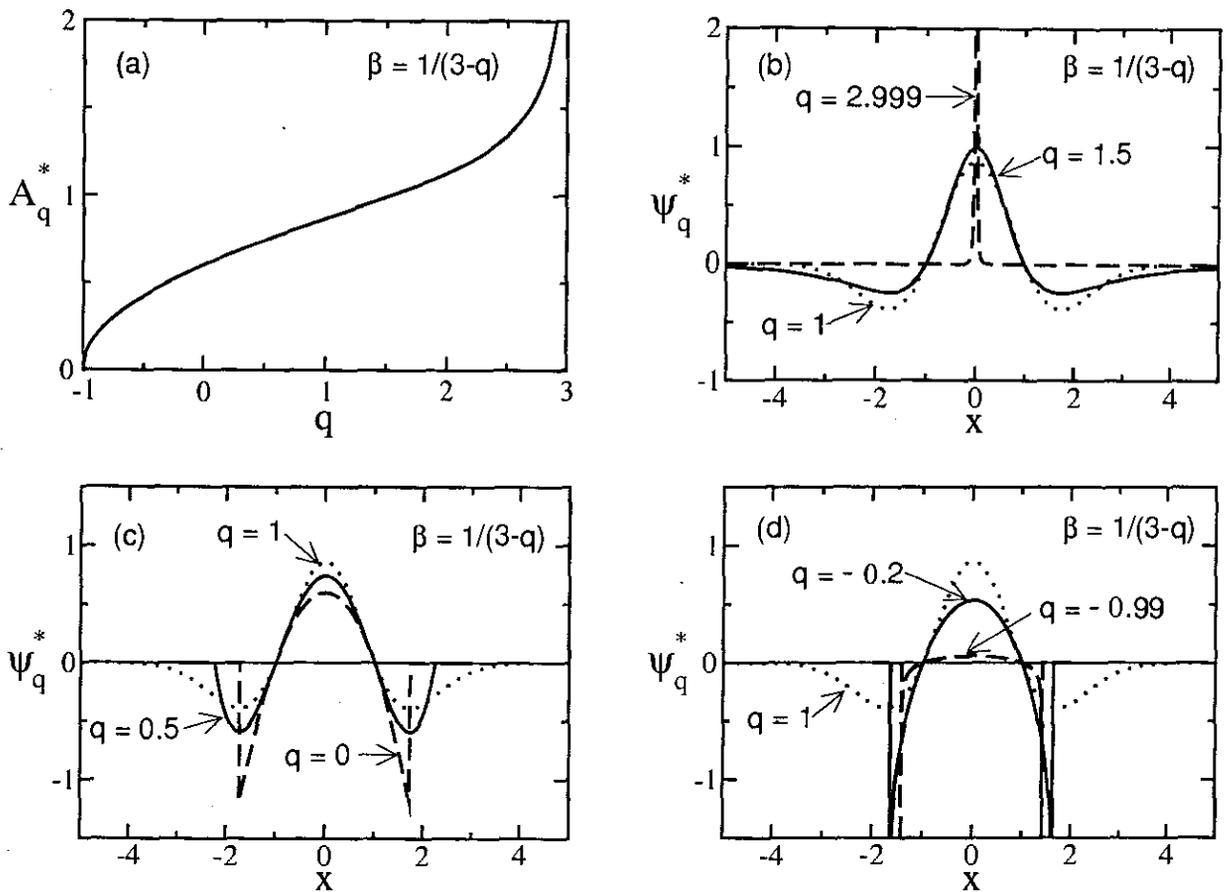


Figura 5.7: q -chapéu mexicano com $\beta = 1/(3 - q)$. (a) Constante de normalização A_q^* ; (b) $\psi_q^*(x)$ para $1 < q < 3$; (c) $0 < q < 1$; (d) $-1 < q < 0$. O chapéu mexicano usual ($q = 1$) é representado em linha pontilhada, para comparação.

5.3 q -Gaussiana modulada

Agora voltamos nossa atenção para a wavelet de Morlet, ou Gaussiana modulada [123, 124, 125], uma função associada com o nascimento da análise de wavelets [126, 101, 108]. Procuramos uma função que seja generalização de [122, 108]:

$$h(x) = \pi^{-1/4} (e_1^{-ikx} - e_1^{-k^2/2}) e_1^{-x^2/2}, \tag{5.32}$$

onde

$$k = \pi(2/\ln 2)^{1/2}. \tag{5.33}$$

Então simplesmente modulamos as funções trigonométricas usuais ($e_1^{-ik_q x}$) com a q -Gaussiana³:

$$h_q(x) = B_q \left(e_1^{-ik_q x} - \Lambda_q(k_q) \right) e_q^{-\beta x^2}, \quad \infty < q < 3. \quad (5.34)$$

A função $\Lambda_q(k_q)$ é tal que a condição de admissibilidade, escrita no domínio das frequências,

$$\mathcal{F}[h_q(x); 0] = 0, \quad (5.35)$$

seja satisfeita. Isto significa que

$$\Lambda_q(k_q) \equiv \frac{\mathcal{F} \left[e_1^{-ik_q x} e_q^{-\beta x^2}; 0 \right]}{\mathcal{F} \left[e_q^{-\beta x^2}; 0 \right]}. \quad (5.36)$$

Levando em consideração a transformada de Fourier de uma q -Gaussiana (vide Apêndice A), também $\mathcal{F}[e_1^{-ik_q x}; y] = \sqrt{2\pi} \delta(y - k_q)$, e ainda o teorema da convolução (com a convenção simétrica para a transformada de Fourier que estamos adotando, Eq. (5.30), a convolução de duas funções fica levemente diferente daquela que apresentamos na Eq. (3.37)):

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[f(x)g(x); y] &= F(y) * G(y) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(y - \xi) G(\xi) d\xi, \end{aligned} \quad (5.37)$$

encontramos

$$\Lambda_q(k_q) = \begin{cases} \frac{2}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1} - \frac{1}{2}\right)} \left(\frac{k_q}{2\sqrt{(q-1)\beta}} \right)^\mu K_\mu \left(\frac{k_q}{\sqrt{(q-1)\beta}} \right), & q > 1, \\ \Gamma\left(\frac{1}{1-q} + \frac{3}{2}\right) \left(\frac{2\sqrt{(1-q)\beta}}{k_q} \right)^{-\mu} J_{-\mu} \left(\frac{k_q}{\sqrt{(1-q)\beta}} \right), & q < 1. \end{cases} \quad (5.38)$$

com $\mu = \frac{1}{q-1} - \frac{1}{2}$. Para determinarmos k_q , seguimos o mesmo critério adotado pela Ref. [122] para a determinação do valor de k_1 : a razão entre o segundo maior máximo local e o máximo de $\text{Re } h_q$ é fixada em $1/2$. Isto resulta que

$$k_q = 2\pi \sqrt{\frac{(q-1)\beta}{2q-1-1}} \quad (q \geq 1). \quad (5.39)$$

³Na Seção 5.4 tratamos do uso das funções q -trigonométricas em wavelets.

A constante de normalização B_q é dada por

$$B_q = \begin{cases} \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{1/4} \left[\frac{(q-1)^{1/2} \Gamma\left(\frac{2}{q-1}\right)}{\Gamma\left(\frac{2}{q-1} - \frac{1}{2}\right)} \right]^{1/2}, & 1 < q < 3, \\ \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{1/4} \left[\frac{(1-q)^{1/2} \Gamma\left(\frac{2}{1-q} + \frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{2}{1-q} + 1\right)} \right]^{1/2}, & q < 1. \end{cases} \quad (5.40)$$

A Figura 5.8 ilustra $h_q^R = \sqrt{2} \operatorname{Re} h_q$ com $\beta(q) = 1/(3-q)$. O fator $\sqrt{2}$ é usado para que a parte real seja normalizada. Observamos a cauda longa, do tipo lei de potência, para $1 < q < 3$, em contraste marcante com a cauda exponencial para $q = 1$, que rapidamente se torna desprezível. O corte está presente para $q < 1$. Quando $q \rightarrow -\infty$, $h_q(x)$ se reduz a uma função de ciclo duplo, sua parte imaginária é uma variação da wavelet seno de um ciclo, apresentada na Ref. [122].

A constante de normalização da função Gaussiana modulada original ($q = 1$), como aparece na Ref. [122] e na Equação (5.32), $B_1 = \pi^{-1/4}$, é, de fato, uma aproximação. A constante exata é dada pela expressão $\tilde{B}_1 = B_1 f_1$, onde o fator de correção f_1 é dado por

$$f_1 = \left(1 - 2e_1^{-3k_1^2/4} + e_1^{-k_1^2}\right)^{-1/2}. \quad (5.41)$$

Com o valor adotado para k_1 (Eq. (5.33)), este fator é próximo a unidade, $(f_1 - 1) \simeq 10^{-9}$, e é negligenciado. Na presente generalização, a Eq. (5.40) é também uma aproximação, sendo a expressão exata $\tilde{B}_q = B_q f_q$, com

$$f_q = \begin{cases} \left[1 + \Lambda_q^2(k_q) - \frac{4 \Lambda_q(k_q)}{\Gamma\left(\frac{2}{q-1} - \frac{1}{2}\right)} \left(\frac{\pi}{\sqrt{2^{q-1}-1}}\right)^{\frac{2}{q-1} - \frac{1}{2}} \right. \\ \quad \left. \times K_{\frac{2}{q-1} - \frac{1}{2}}\left(\frac{2\pi}{\sqrt{2^{q-1}-1}}\right) \right]^{-1/2} & q > 1, \\ \left[1 + \Lambda_q^2(k_q) - 2 \Lambda_q(k_q) \Gamma\left(\frac{2}{1-q} + \frac{3}{2}\right) \right. \\ \quad \left. \times \left(\frac{\sqrt{1-2^{q-1}}}{\pi}\right)^{\frac{2}{1-q} + \frac{1}{2}} J_{\frac{2}{1-q} + \frac{1}{2}}\left(\frac{2\pi}{\sqrt{1-2^{q-1}}}\right) \right]^{-1/2} & q < 1. \end{cases} \quad (5.42)$$

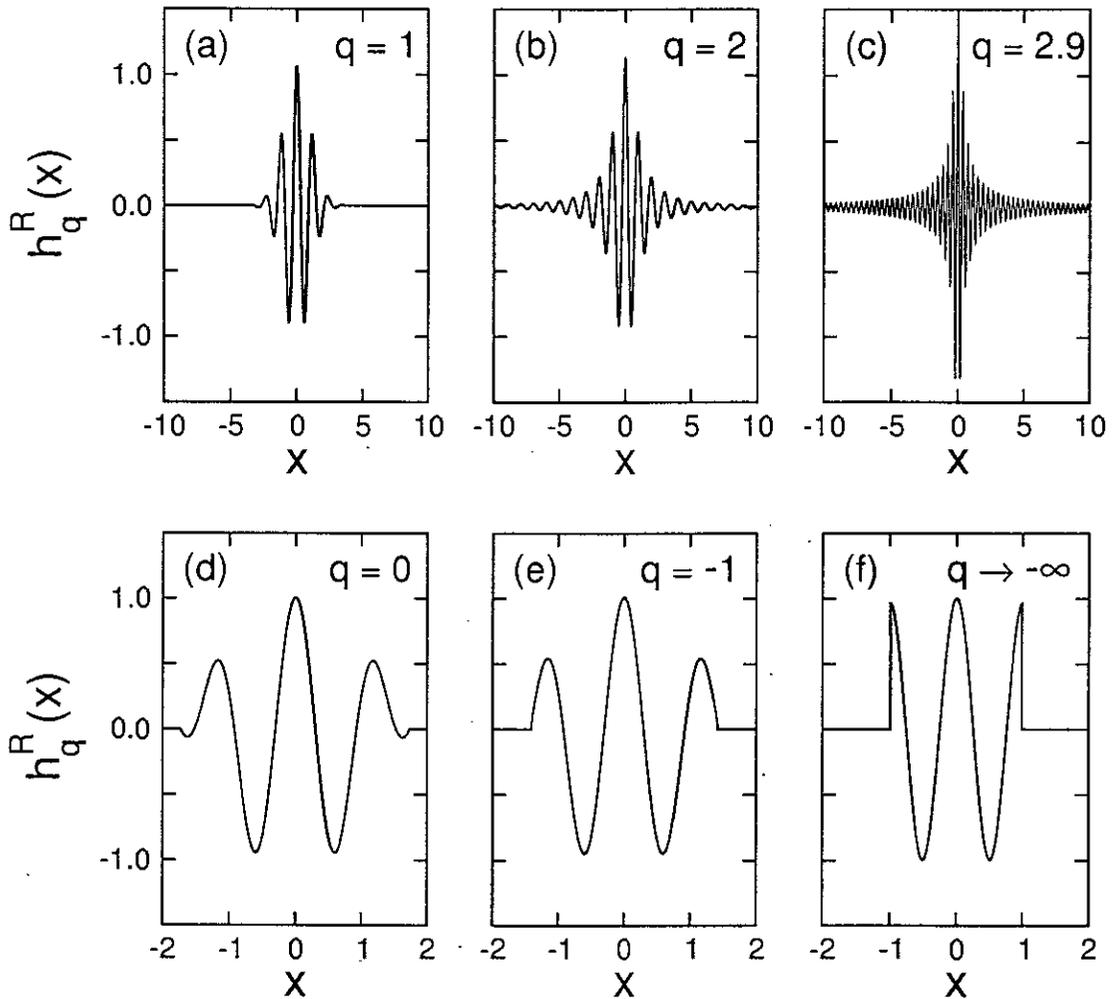


Figura 5.8: Parte real normalizada da q -Gaussiana modulada ($h_q^R(x) \equiv \sqrt{2} \operatorname{Re} h_q$). (a) $q = 1$ (caso usual); (b) $q = 2$; (c) $q = 2.9$ (para ilustrar a tendência ao limite superior $q \rightarrow 3$); (d) $q = 0$; (e) $q = -1$; (f) $q \rightarrow -\infty$ (ilustrado com $q = -100$). Note que as escalas das abscissas nas figuras superiores (a)–(c) são diferentes daquelas nas figuras inferiores (d)–(f).

A Figura 5.9 ilustra $(f_q - 1)$ versus q . Na região $q > 1$ (Figura (a)), existe um máximo em torno de $q \simeq 2.5$, da ordem de $5 \cdot 10^{-5}$. Para $q < 1$ (Figura (b)), os máximos desvios ocorrem para $q \simeq -0.4$ e $q \simeq -4.5$, ambos da ordem de 10^{-3} (em valores absolutos). É uma aproximação menos acurada que aquela para o caso usual (f_1), mas eventualmente ainda aceitável. Se maior acurácia for desejada, devemos usar \tilde{B}_q com as Equações (5.42).

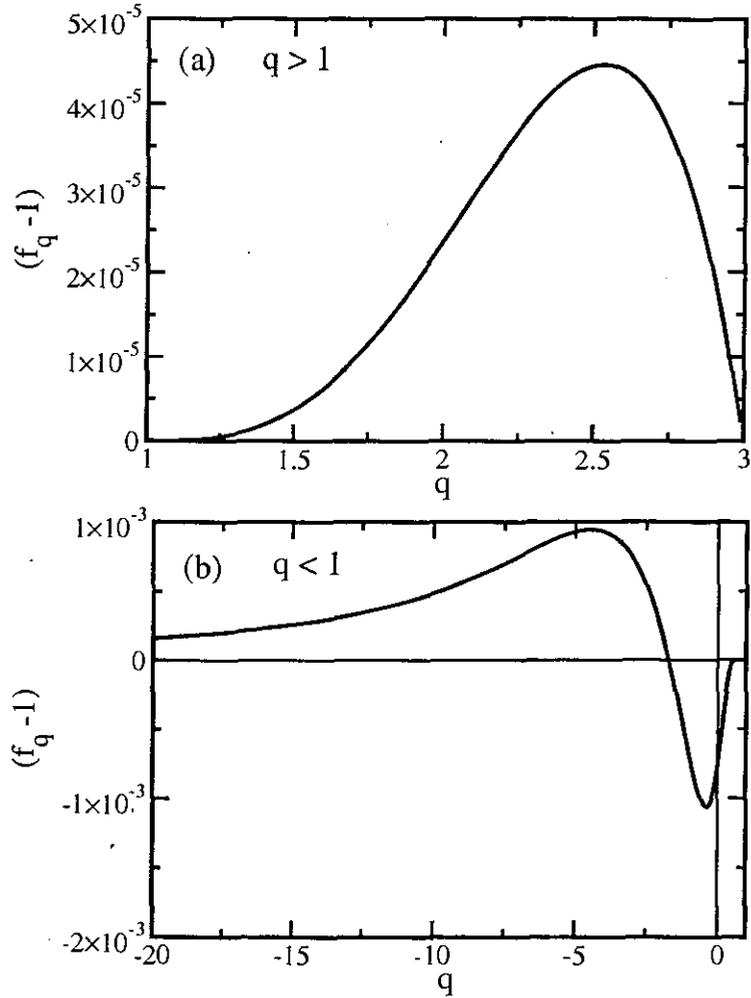


Figura 5.9: Fator de correção f_q para constante de normalização da q -Gaussiana modulada. (a) $q > 1$; (b) $q < 1$. Note que ambas as escalas (abscissas e ordenadas) das duas figuras são diferentes.

5.4 Wavelets q -trigonométricas

Queremos construir wavelets baseadas nas funções q -trigonométricas (Capítulo 4). Para tanto, relembramos que a derivada de uma q -exponencial pode ser expressa pela Equação (2.30), $de_q^x/dx = e_{2-q}^{qx}$. Uma vez que $\rho_{q>1}(x) \rightarrow 0$ para $|x| \rightarrow \infty$ (vide Eq. (4.10)), a condição de admissibilidade, Eq. (5.18), é satisfeita para $1 < q < 2$. Renomeando o parâmetro q , definimos a seguinte wavelet q -trigonométrica:

$$w_q(x) \equiv C_q e_q^{\frac{ix}{2-q}}, \quad 1 < q < 2. \quad (5.43)$$

A constante de normalização é dada por

$$C_q = \sqrt{\frac{1}{2-q}} \frac{1}{\pi^{1/4}} \left[\frac{(q-1) \Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1} - \frac{1}{2}\right)} \right]^{1/2}. \quad (5.44)$$

Por economia de notação, podemos escrever as partes real e imaginária de $w_q(x)$ como

$$wc_q(x) \equiv \sqrt{2} \operatorname{Re} w_q(x) = \sqrt{2} C_q \cos_q \left(\frac{x}{2-q} \right), \quad (5.45)$$

$$ws_q(x) \equiv \sqrt{2} \operatorname{Im} w_q(x) = \sqrt{2} C_q \operatorname{sen}_q \left(\frac{x}{2-q} \right). \quad (5.46)$$

Algumas curvas típicas são apresentadas nas Figuras 5.10 e 5.11, e a constante de normalização C_q aparece na Figura 5.12.

Notemos que o número de oscilações decresce a medida que q vai de 1 a 2. As funções apresentam infinitas oscilações de amplitudes nulas em $q \rightarrow 1$ ($C_{q \rightarrow 1} \rightarrow 0$). $1/C_q$ é a normalização da wavelet. O limite $q \rightarrow 1$ evidencia a divergência das ondas planas. Estas q -wavelet trigonométricas são uma espécie de q -onda plana, e tem a interessante propriedade de terem norma *finita* para $q \neq 1$. $ws_q(x)$ apresenta uma única raiz, em $(0, 0)$, para $3/2 \leq q < 2$, e $wc_q(x)$ apresenta apenas um par de raízes em $x_0 = \pm \frac{2-q}{q-1} \tan \left[(q-1) \frac{\pi}{2} \right]$, para $4/3 \leq q < 2$. A medida que $q \rightarrow 2$, $C_q \rightarrow \infty$, e as wavelets se tornam localizadas (as raízes de $wc_q(x)$ se aproximam de $\pm 2/\pi$). Mencionemos também que a modulação

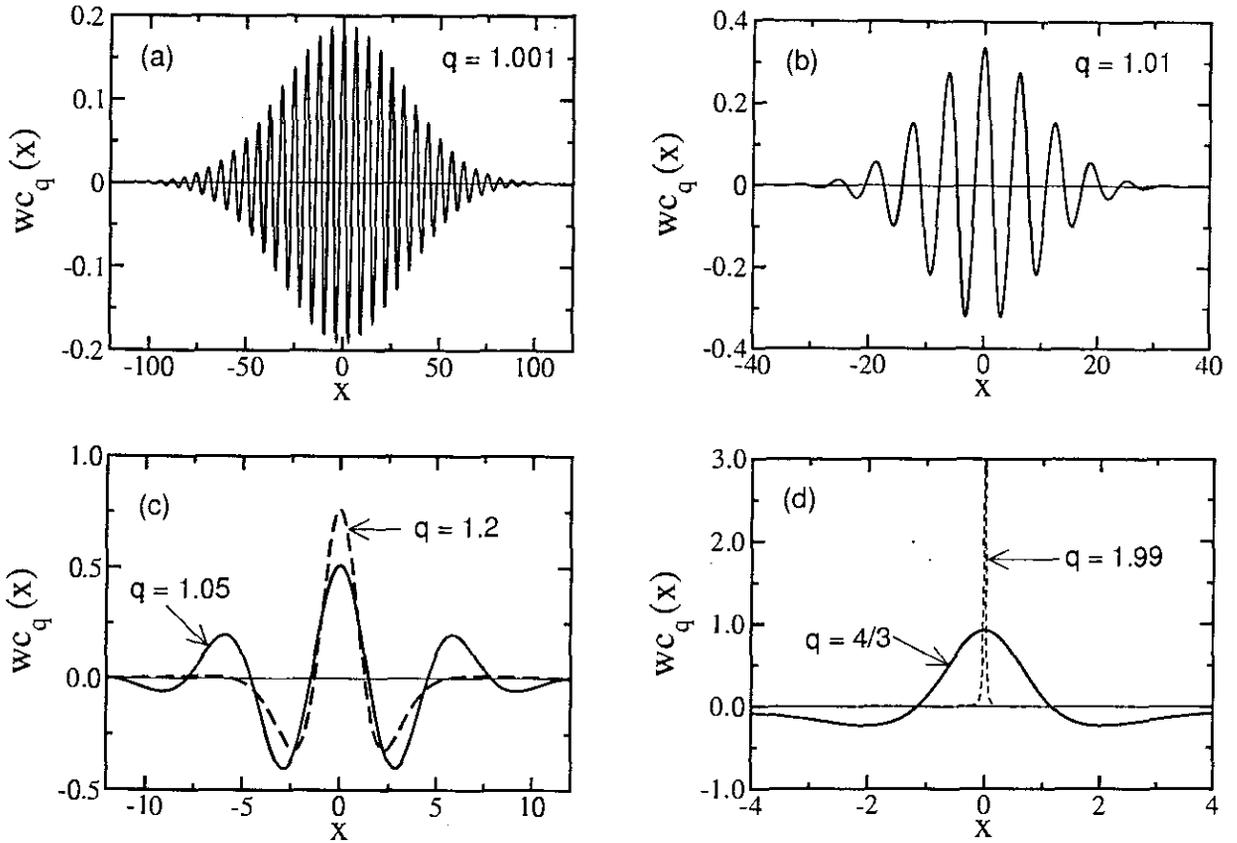


Figura 5.10: $wc_q(x)$ para diferentes valores de q . (a) $q = 1.001$; (b) $q = 1.01$; (c) $q = 1.05$ (linha sólida), $q = 1.2$ (linha tracejada); (d) $q = 4/3$ (sólida), $q = 1.99$ (tracejada), ilustrando região na qual $wc_q(x)$ apresenta apenas um par de raízes. Note que as escalas das abscissas e ordenadas variam de uma figura a outra.

das funções não é Gaussiana, mas sim uma lei de potências; esta modulação, entretanto, é diferente da q -Gaussiana modulada, desenvolvida na Seção 5.3 anterior.

As transformadas de Fourier de $wc_q(x)$ e $ws_q(x)$ são obtidas usando as Equações (4.70) e (4.71) e (vide [85, Eq.s 3.382 6 e 3.382 7])

$$\mathcal{F} [e_{q>1}^{iax}; y] = \begin{cases} 0, & y > 0, \\ \frac{\sqrt{2\pi} (-y)^{\frac{1}{q-1}-1} e_1^{\frac{-y}{(q-1)a}}}{[(q-1)a]^{\frac{1}{q-1}} \Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)}, & y < 0, \end{cases} \quad (5.47)$$

e

$$\mathcal{F} [e_{q>1}^{-iax}; y] = \begin{cases} \frac{\sqrt{2\pi} y^{\frac{1}{q-1}-1} e_1^{\frac{-y}{(q-1)a}}}{[(q-1)a]^{\frac{1}{q-1}} \Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)}, & y > 0, \\ 0, & y < 0. \end{cases} \quad (5.48)$$

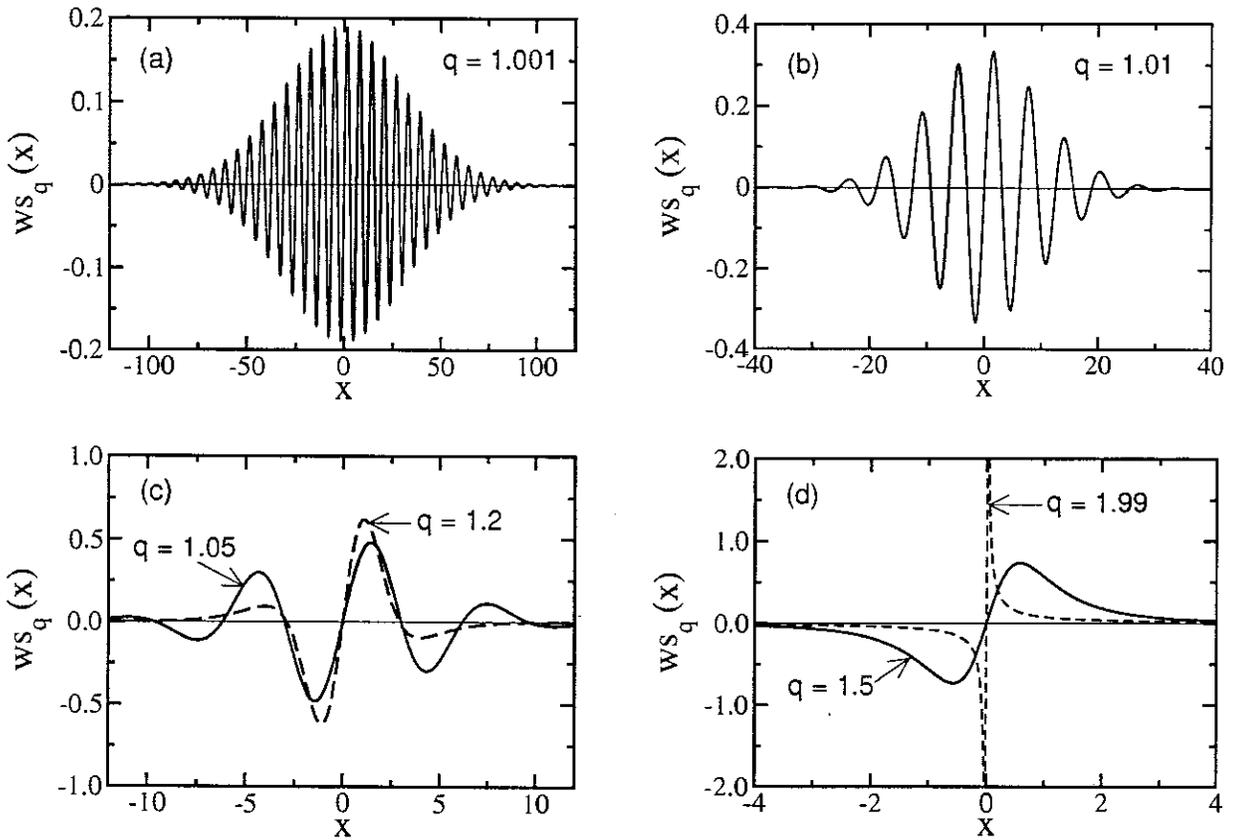


Figura 5.11: $ws_q(x)$ para diferentes valores de q . (a) $q = 1.001$; (b) $q = 1.01$; (c) $q = 1.05$ (linha sólida), $q = 1.2$ (linha tracejada); (d) $q = 1.5$ (sólida), $q = 1.99$ (tracejada), ilustrando região na qual $ws_q(x)$ apresenta apenas uma raiz, em $x = 0$. Note que as escalas das abscissas e ordenadas variam de uma figura a outra.

A Figura 5.13 ilustra o comportamento de $\mathcal{F}[wc_q(x); y]$ para diferentes valores de q . Para $q \rightarrow 1$, a transformada de Fourier se reduz a duas deltas de Dirac, em $y = \pm 1$. Para $q \rightarrow 2$, ela coincide com o eixo das abscissas. $\mathcal{F}[wc_q(x); y]$, e também $\mathcal{F}[ws_q(x); y]$, não são analíticas em $y = 0$ para $3/2 \leq q < 2$, como mostra o detalhe da Figura.

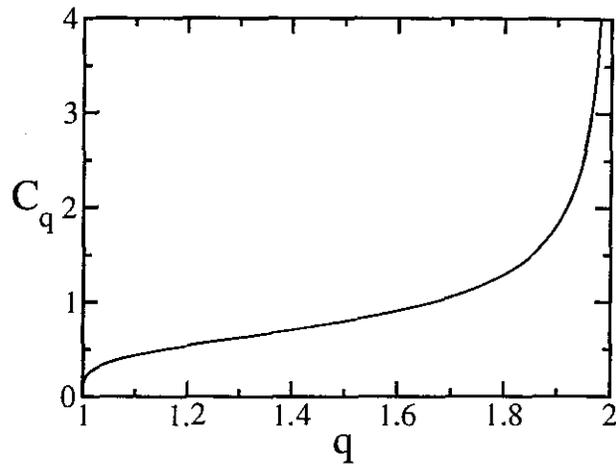


Figura 5.12: Constante de normalização C_q das wavelets q -trigonométricas. O limite $1/C_{q \rightarrow 1} \rightarrow \infty$ evidencia a não normalização das ondas planas.

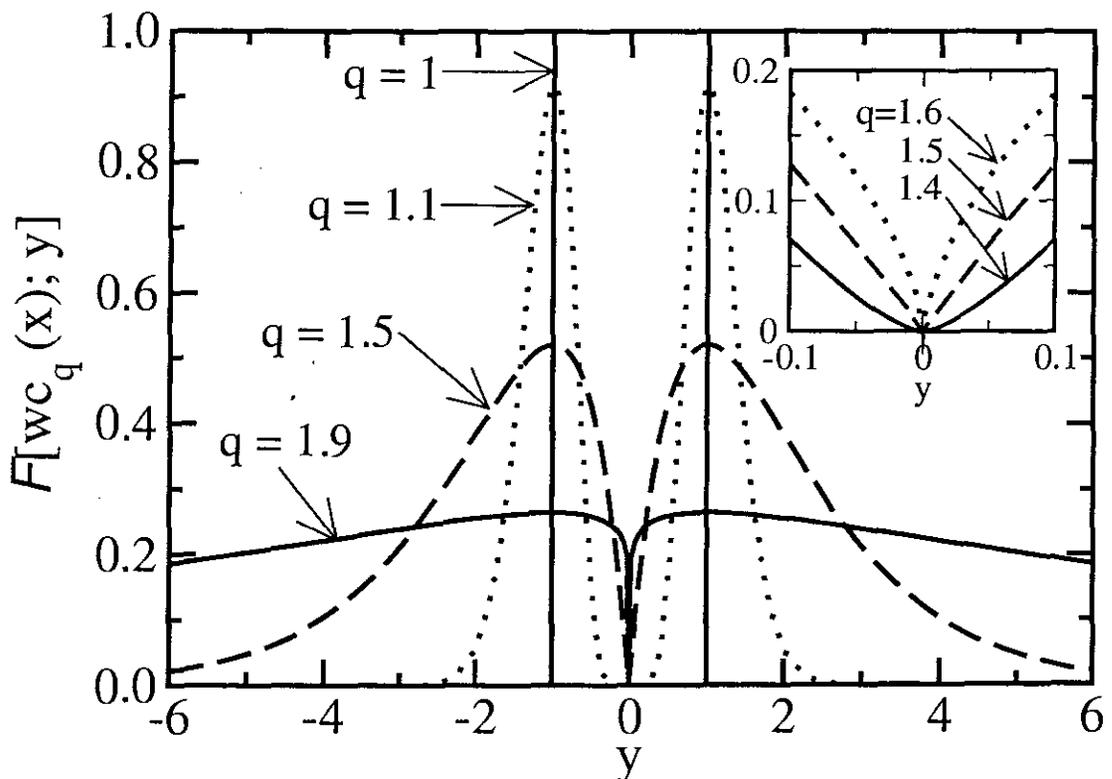


Figura 5.13: Transformada de Fourier da wavelet q -co-seno. $q = 1$ (linhas sólidas verticais em ± 1); $q = 1.1$ (pontilhada); $q = 1.5$ (tracejada); $q = 1.9$ (sólida). O detalhe amplifica a região próxima a zero, evidenciando cuspide para $q \geq 1.5$.

Parte II

Sistemas Complexos

A ciência parece estar caminhando na direção da interdisciplinaridade¹. A Física tem tido um papel importante neste percurso de demolição das barreiras entre as disciplinas. Desnecessário citar as interações e os valiosos resultados obtidos junto à biologia, medicina, química, e tantas outras ciências. Esse movimento de integração de saberes representa uma mudança fundamental: sistemas biológicos, sociais etc. apresentam padrões de comportamento bastante diferentes daqueles que a Física costumava se dedicar (massa-mola, partículas livres, corpos rígidos etc.). Aqueles poderiam ser considerados *sistemas simples*, enquanto estes novos são ditos *complexos*.

Não há uma definição clara e unânime do que venha a ser um sistema complexo. Tampouco há para um sistema simples. Alguns livros, embora não possam ser considerados “clássicos” (pois a relativa contemporaneidade do tema torna incompatível o uso desta palavra), merecem um destaque. Não fazemos aqui uma listagem longa; apenas quatro deles: o de Murray Gell-Mann [128], o de David Ruelle [129], o de Benoît Mandelbrot [130] e o de Per Bak [2]. Neles, o leitor pode encontrar explicações e exemplos que podem clarificar diferenças entre o simples e o complexo. Referência mundial também é o Instituto Santa Fé, nos Estados Unidos, criado em 1984, sendo Gell-Mann um de seus fundadores, dedicado a estudos da simplicidade e da complexidade [131, 128, 2].

Como é freqüente, quando não sabemos definir algo, partimos para exemplos (em vez do caminho dedutivo, usamos o indutivo). Mesmo sem sabermos defini-los *a priori*, parece não haver dúvidas que são complexos o sistema imunológico, o sistema nervoso central, a interação e evolução das espécies, a origem da vida, dentre muitos outros. Tomemos o que fez Moysés Nussenzveig [132], listando características do comportamento cerebral também encontradas (em diferentes graus) em outros sistemas complexos:

1. *Sistemas Macroscópicos*: formados por um grande número de elementos.
2. *Sistemas abertos*: interagindo com o ambiente, e cada elemento interage com um número bem menor de outros elementos (em relação ao número total).

¹Os estudos envolvendo as interações entre os vários saberes têm tido amplo desenvolvimento nos últimos anos, e algumas palavras apresentam significados específicos. Em caráter hierárquico crescente, existem as abordagens intradisciplinares, multidisciplinares, interdisciplinares e transdisciplinares (e além ...). Para o leitor interessado nas diferenças entre esses conceitos, recomendamos a Ref. [127]. Utilizamos aqui a palavra *interdisciplinar* no seu sentido mais laico.

3. *Não-linearidade*: cada elemento responde de forma não-linear, de acordo com os estímulos que recebe daqueles com os quais interage.
4. *Frustração*: estímulos recebidos por um dado elemento podem ser contraditórios, e nem todos podem ser satisfeitos simultaneamente.
5. *Aprendizado*: o sistema é adaptativo, i.e., sua estrutura interna se transforma à medida que interage com o ambiente. Esta é uma característica de memória.
6. *Aleatoriedade*: algumas características do sistema são distribuídas ao acaso.
7. *Auto-organização*: o sistema evolui espontaneamente para um estado com um certo grau de ordem, mesmo iniciando em um estado originalmente desordenado.
8. *Transição entre ordem e caos*: usualmente o sistema vive em um estado limítrofe entre os comportamentos ordenado e caótico.
9. *Sistemas hierárquicos*: um dado estímulo é tratado por elementos situados em diferentes níveis. Esta característica implica no efeito da granulação a ser usada (*graining*).
10. *Atratores múltiplos*: muitos possíveis estados terminais de quase-equilíbrio, ou equilíbrio meta-estável.
11. *Quebra de ergodicidade*: o sistema pode ficar preso em algum, ou alguns, dos estados possíveis, deixando de visitar outros.
12. *Propriedades coletivas emergentes*: as propriedades do sistema não são simplesmente o resultado do conjunto das propriedades de seus elementos. Surgem algumas propriedades tipicamente coletivas, que não estavam presentes nas características dos elementos, tomados individualmente. São propriedades dependentes do contexto.
13. *Fractalidade*: sistemas com auto-similaridade (independência de escala).
14. *Leis de Potência*: dominantes em sistemas com estrutura fractal, estão bastante presentes em sistemas complexos.

15. *Redes do tipo mundo-pequeno (small-world) ou análogas*: São estruturas em rede que apresentam características tanto de redes ordenadas (grau de compactação relativamente alto) como de redes caóticas (distância mínima média entre dois sítios tomados ao acaso relativamente pequena). Esta característica se assemelha à do item 8.

Pode ajudar também analisarmos um contra-exemplo. O gás ideal seguramente é um sistema simples, talvez um dos mais simples (pois maior simplicidade seria uma única partícula livre, que quase não satisfaz o conceito de sistema, num sentido rigoroso). O gás é composto por um grande número de partículas não-interagentes, é ergódico, suas propriedades podem ser mapeadas no comportamento de uma única partícula livre (ausência de comportamentos coletivos emergentes), existência de um único atrator, o estado de equilíbrio de Boltzmann-Gibbs, etc.

A dependência do contexto, típica em sistemas complexos, muitas vezes é representada pela frase “o todo é maior que a soma das partes”. Poderíamos dizer que sistemas complexos são sistemas *holísticos* (no sentido etimológico da palavra), enquanto sistemas simples são *reducionísticos*. Sob esse ponto de vista, a Física se voltar para tais tipos de sistema representa uma mudança de paradigmas estabelecidos desde Descartes [133]². Estamos provavelmente vivendo um período de revolução científica, no sentido que Thomas Kuhn enunciara [134]. Esta visão de mudança de paradigmas é compartilhada por alguns cientistas, p. ex., Giorgio Parisi [135]. Que bom para todos nós, que podemos estar participando deste momento histórico!

Para sintetizar o que significa um sistema complexo, Klaus Mainzer utilizou como epíteto em seu livro [136] a seguinte frase de Hegel, retirada de “A Fenomenologia do Espírito”, de 1807:

“The whole, however, is merely the essential nature reaching its completeness through the process of its own development”.

² O reducionismo fica evidenciado nos 2º e 3º dos quatro preceitos cartesianos [133, p. 54]: “O segundo, o de dividir cada uma das dificuldades que eu examinasse em tantas parcelas quantas possíveis e quantas necessárias fôssem para melhor resolvê-las. O terceiro, o de conduzir por ordem meus pensamentos, começando pelos objetos mais simples e mais fáceis de conhecer, para subir, pouco a pouco, como por degraus, até o conhecimento dos mais compostos, e supondo mesmo uma ordem entre os que não se precedem naturalmente uns aos outros.”

Nos Capítulos seguintes, vamos analisar alguns sistemas complexos, evidenciando relações com a mecânica estatística não-extensiva. Possivelmente este formalismo seja o adequado para descrição desses sistemas, ou pelo menos de uma (ou algumas) classe(s) de universalidade de sistemas complexos. Na Ref. [137], Tsallis havia sugerido o índice entrópico q como uma possível medida da complexidade de um sistema. No Capítulo 6 analisamos sistemas dinâmicos dissipativos de baixa dimensionalidade no limiar do caos. No Capítulo 7 consideramos a outra extremidade, sistemas conservativos de alta dimensionalidade, com interações de longo alcance. Finalmente no Capítulo 8 ilustramos alguns outros exemplos de sistemas complexos cujas distribuições são bem ajustadas por equações que emergem da mecânica estatística não-extensiva.

Capítulo 6

Sistemas dissipativos de baixa dimensionalidade

Conexões entre dinâmica e termodinâmica não estão completamente elucidadas. Frequentemente, termoestatística soa como se consistisse em um corpo teórico auto-referido, que poderia dispensar a dinâmica de sua formulação. Mas, embora popular, sabe-se desde muito que este ponto de vista não é verdadeiro (vide Ref. [138] e referências lá contidas). Uma possível razão para que este ponto essencial tenha sido pouco enfatizado é que, quando lidando com sistemas fracamente interagentes, o equilíbrio de Boltzmann-Gibbs pode ser formulado sem se referir à dinâmica subjacente de seus constituintes. Quando sistemas complexos ganharam atenção no cenário científico, se tornou necessário rever este ponto fundamental (vide Ref. [139]). Estamos considerando a denominação *sistemas complexos* aqueles que apresentam pelo menos uma das características: interações de longo alcance, memória de longa duração, natureza fractal (ou multi-fractal) de um espaço de fases pertinente, estrutura em rede do tipo mundo pequeno (*small world*), entre outros. Na verdade são conhecidos um número significativo de sistemas que não são descritos adequadamente por conceitos oriundos do formalismo de Boltzmann-Gibbs. Não se sabe ainda qual a mecânica estatística que suporta tais sistemas, nem mesmo se existe uma única. Seguramente a(s) candidata(s) obrigatoriamente deve(m) conter, como caso particular, o formalismo de Boltzmann-Gibbs. Uma forte candidata é a tratada na presente tese, a mecânica estatística não-extensiva. Forte candidata pelo número de exemplos que são ajustados por equações que emergem deste formalismo (alguns ilustrados

ao longo desta Parte II), pelo seu formalismo teórico, que tem sido desenvolvido com elegância e coerência (alguns exemplos tratados na Parte I, embora haja varios outros desenvolvimentos na literatura). Mas isto não basta, é preciso ter um caráter preditivo. Predizer o valor do parâmetro q não é tarefa simples, e possivelmente cada sistema, ou sistemas pertencentes a uma mesma classe de universalidade, tenha um método mais adequado para fazê-lo. Certamente esses métodos têm, em suas bases, a dinâmica do problema, i.e., sob essa perspectiva, a dinâmica assume um caráter mais fundamental que a termodinâmica, aliás, de acordo com a visão mecanicista de Boltzmann!

As características de não-extensividade costumam aparecer no limiar do caos. O sistema mais simples que apresenta comportamentos periódico ou caótico, com uma transição bem definida entre estes regimes, é o mapa logístico. Este sistema dissipativo unidimensional, ou suas variantes, tem sido estudados segundo esta linha da mecânica estatística não-extensiva.

O objetivo deste Capítulo é analisar alguns aspectos de sistemas dissipativos de baixa dimensionalidade, dentro da classe de universalidade do mapa logístico: os mapas z -logístico e o mapa de Hénon. A Seção 6.1 apresenta alguns procedimentos que mostram relações entre esses mapas e a mecânica estatística não-extensiva. Apresenta resumidamente resultados prévios da literatura, com abordagens diferentes para o mesmo sistema, originando valores distintos para o parâmetro entrópico q (em uma das abordagens, $q < 1$, na outra, $q > 1$). Seu principal objetivo é localizar o problema a ser introduzido na Seção 6.2, esta sim trazendo colaboração nossa. Neste ponto vamos apresentar uma possível relação entre as duas categorias de abordagens, mostrando que os distintos parâmetros q encontrados estão relacionados por uma lei de escala. A Seção 6.3 ilustra três exemplos de outros sistemas, não unicamente de baixa dimensionalidade, (exemplos previamente publicados na literatura) que apresentam evidências empíricas da dualidade do parâmetro entrópico (a observação da possível dualidade foi resultado de um trabalho que também participamos como colaborador).

6.1 Mapas dissipativos de baixa dimensionalidade e não-extensividade

Consideremos o mapa z -logístico:

$$x_{t+1} = 1 - ax_t^z, \quad \left(\begin{array}{l} -1 \leq x \leq 1 \\ 0 < a \leq 2 \\ z > 1 \\ t = 0, 1, 2, \dots \end{array} \right). \quad (6.1)$$

Naturalmente $z = 2$ recupera o caso do mapa logístico tradicional¹. O tratamento estatístico para o problema divide o espaço de fases x em W células igualmente espaçadas e N condições iniciais independentes (tipicamente $N \gg W$). A probabilidade p_i de uma célula i estar ocupada é dada pela razão entre o número de pontos no interior desta célula i e o número total de pontos.

Estamos interessados em tratar este sistema *no limiar do caos*. O caso caótico (o mapa logístico é completamente caótico para $a = 2$, $z = 2$) é bem descrito de acordo com a mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs ($q = 1$) e não nos interessa explorá-lo ainda mais.

As abordagens para o problema, dentro do formalismo não-extensivo, podem ser classificadas em duas categorias:

- (i) Métodos baseados na sensibilidade às condições iniciais,
- (ii) Métodos baseados na taxa de relaxação para o atrator.

Uma diferença básica entre eles está na condição inicial: Os métodos do tipo (i) consideram conhecimento completo no tempo inicial (todos os N pontos localizados no interior de uma única célula, conseqüentemente entropia nula), enquanto os métodos (ii) consideram máxima falta de informação (pontos espalhados por todo o espaço de fases, portanto entropia máxima). Esses métodos originam valores *diferentes* para q , particularmente

¹É freqüente na literatura considerar o mapa logístico escrito na forma $y_{t+1} = ry_t(1 - y_t)$, com $0 < r \leq 4$ e $0 \leq y \leq 1$. Esta forma é completamente equivalente à Eq. (6.1) (para $z = 2$), através de uma conjugação topológica (vide [40]). Para $z = 2$, os parâmetros a e r estão relacionados por $r = (1 + 4a)^{1/2} + 1$. Escrito na forma da Eq. (6.1), o mapa fica mais simples de ser generalizado para uma potência $z > 1$ qualquer.

$q < 1$ para os métodos (i) e $q > 1$ para (ii). Assim, esses parâmetros não-extensivos são distintos e merecem nomenclaturas diferenciadas. Denominamos² q_{sen} para os parâmetros oriundos dos métodos baseados na *sensibilidade* às condições iniciais ($q_{sen} < 1$) (outra possível notação é q_{mix} , de *mixing*, utilizada em [140, 39]), e q_{rel} ($q_{rel} > 1$) para parâmetros que emergem dos métodos baseados na *relaxação* para o atrator (ou, alternativamente q_{eq} , de *equilibration*, notação utilizada em [140, 39]).

Já foram desenvolvidos três diferentes abordagens para a categoria (i), que vamos descrevê-los brevemente.

(i.a) Método baseado na sensibilidade às condições iniciais

Inicialmente desenvolvido em [141], este método define a variável $\xi(t)$ por

$$\xi(t) \equiv \lim_{\Delta x(0) \rightarrow 0} \frac{\Delta x(t)}{\Delta x(0)}. \quad (6.2)$$

São gerados dois sistemas muito próximos ($\Delta x(0) \rightarrow 0$), e a evolução temporal da distância $\Delta x(t)$ entre eles é acompanhada. Sistemas periódicos (ou ordenados) apresentam baixa sensibilidade às condições iniciais, particularmente

$$\xi(t) \sim e^{\lambda t} \quad (\lambda < 0), \quad (6.3)$$

sendo λ o expoente de Lyapunov. Já os sistemas caóticos apresentam forte sensibilidade às condições iniciais,

$$\xi(t) \sim e^{\lambda t} \quad (\lambda > 0), \quad (6.4)$$

i.e., divergência exponencial de órbitas vizinhas (caos forte)³. Ambos os casos são bem descritos dentro do formalismo de Boltzmann-Gibbs. Fenômenos não-extensivos aparecem justamente no limiar do caos, quando $\lambda = 0$. A julgar pelas Equações (6.3) e (6.4),

²Algumas vezes na literatura esse parâmetro é denominado q^* .

³A seguinte frase de Nietzsche, segundo penso, expressa a essência da idéia de forte sensibilidade às condições iniciais, com beleza e elegância: “O que eu faço ou não neste momento é tão importante para tudo o que está por vir quanto os maiores eventos passados; sob essa enorme perspectiva de seus efeitos, todos os atos são igualmente grandes ou pequenos.” [142].

as órbitas colocadas infinitamente próximas no instante inicial assim permaneceriam ao longo de sua evolução temporal. Mas não é o que ocorre. Os casos anteriores (periódico e caótico) tem a variável ξ obedecendo à equação diferencial

$$\frac{d\xi}{dt} = \lambda\xi. \quad (6.5)$$

Quando $\lambda = 0$, esta Equação não mais rege o fenômeno. Uma possibilidade é a seguinte forma generalizada:

$$\frac{d\xi}{dt} = \lambda_{q_{sen}} \xi^{q_{sen}}. \quad (6.6)$$

O caso $q_{sen} = 1$ naturalmente recupera os anteriores, com $\lambda_1 \equiv \lambda$. Para $q_{sen} \neq 1$, já sabemos, ξ assume uma forma q -exponencial

$$\xi(t) = [1 + (1 - q_{sen})\lambda_{q_{sen}} t]^{\frac{1}{1-q_{sen}}}, \quad (6.7)$$

que tem uma cauda do tipo lei de potência. Quando $\lambda_{q_{sen}} < 0$, temos o caso *fracamente* ordenado, enquanto $\lambda_{q_{sen}} > 0$ ocorre para sistemas *fracamente* caóticos (casos que podem ser classificados como de dinâmica *lenta*). Os autores de [141] encontraram, para o mapa logístico (e posteriormente o estudo foi estendido para mapas z -logísticos, em [143]) no limiar do caos (ponto de acumulação das bifurcações de duplicação de período, $a = a_c$), $q_{sen} = 0.2445\dots$ (os valores de q_{sen} e de a_c dependem de z ; as Tabelas 6.1 e 6.2, no final da Seção 6.2, reportam todos os parâmetros utilizados na nossa análise). Neste trabalho os autores também analisam outras situações, como os pontos de bifurcação por duplicação de período (e não apenas seu ponto de acumulação, que é o limiar do caos) e pontos de bifurcação tangente. Para o momento, nos basta os aspectos ora mencionados deste importante artigo.

(i.b) Métodos baseados na natureza geométrica do atrator crítico

Originalmente em [144] (e mais longamente em [145, 146],) foi analisada a natureza geométrica do atrator do mapa z -logístico (e também do mapa circular) no limiar do caos.

Neste limite, o sistema é multi-fractal, caracterizado por uma função $f(\alpha)$, limitada inferiormente por α_{min} e α_{max} (pontos terminais do espectro de singularidades, representando as regiões mais concentradas e mais rarefeitas, respectivamente, do atrator). Os autores encontraram a relação

$$\frac{1}{q_{sen} - 1} = \frac{1}{\alpha_{min}} - \frac{1}{\alpha_{max}}. \quad (6.8)$$

Esta relação é bastante interessante, pois relaciona aspectos *dinâmicos* (lado esquerdo) com aspectos *geométricos* (lado direito). Em outras palavras, conhecida a geometria do atrator, é possível determinar qual a estatística (valor de q_{sen}) que o sistema obedece! Para $z = 2$, este procedimento origina o mesmo valor, $q_{sen} = 0.2445 \dots$

(i.c) Taxa de crescimento da entropia

A Ref. [141] já havia introduzido a noção da q -generalização da entropia de Kolmogorov-Sinai:

$$K_{q_{sen}} \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{W \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{S_{q_{sen}}(t)}{t}, \quad (6.9)$$

e também a relacionando com o parâmetro de Lyapunov generalizado, $\lambda_{q_{sen}}$, através da q -igualdade de Pesin:

$$K_{q_{sen}} = \lambda_{q_{sen}}. \quad (6.10)$$

Na Ref. [147], foi analisada a taxa de crescimento da entropia para o mapa logístico. Como os casos anteriores, o espaço de fases é dividido em W células, e inicialmente N pontos (usualmente $N \gg W$) são colocados no interior de uma única célula ($S_q(t=0) = 0, \forall q$)⁴. Então é analisada a evolução dinâmica do mapa. Para o caso completamente caótico ($a = 2$ na Eq. (6.1)), foi verificado que o valor $q = 1$ gera um crescimento *linear* da entropia S_1 , ou seja, a taxa de geração de entropia é *finita* quando $q = q_{sen} = 1$ no caso logístico completamente caótico. Quando $q < 1$, a taxa de geração de entropia S_q diverge,

⁴O símbolo N para número de pontos, ou número de mapas, não deve ser confundido com o número de partículas do Capítulo 7.

e quando $q > 1$, a taxa vai a zero. Assim se obtém que o valor adequado de q_{sen} para se analisar o sistema (completamente caótico, vale lembrar) é $q_{sen} = 1$, como seria de se esperar. O procedimento foi repetido, agora no limiar do caos ($a = a_c = 1.40115519\dots$). O mesmo esquema se repete: existe um único valor de q para o qual a taxa de geração de entropia é finita. No limiar do caos, o valor encontrado é $q = q_{sen} = 0.2445\dots$, precisamente o mesmo dos métodos anteriores! Posteriormente, este mesmo método foi aplicado ao mapa z -logístico (Eq. (6.1)), e também para o mapa z -co-seno [148].

Recentemente [149, 150, 151] foram obtidos resultados *analíticos* corroborando o valor $q_{sen} = 0.2445\dots$ encontrado numericamente através dos métodos (i.a-c) mencionados, utilizando técnicas de grupo de renormalização. Estes trabalhos são de grande importância para a estrutura lógica da mecânica estatística não-extensiva, pois ajudam a formar um corpo teórico fechado.

Vamos agora ao Método (ii) (até o momento desenvolvido apenas um procedimento):

(ii) Método baseado na taxa de relaxação para o atrator

Este procedimento foi desenvolvido na Ref. [152], e consiste em investigar o sistema dinâmico (no caso, o mapa z -logístico, e também o mapa circular) iniciando com pontos distribuídos em todo espaço de fases (estado inicial ergódico). Neste caso, a entropia no tempo inicial é máxima (ensemble micro-canônico), dada por

$$S_{q_{rel}}(0) = \frac{W^{1-q_{rel}} - 1}{1 - q_{rel}}, \quad (6.11)$$

que tem como caso particular, $S_1(0) = \ln W$ (estamos adotando a constante dimensional (constante de Boltzmann no caso usual) com valor unitário, $k = 1$). A partir de então, observa-se a redução no volume ocupado pelos pontos, $W(t)$, redução esta tanto maior quando maior o sistema (maiores valores de W e N). A evolução temporal de $W(t)$ é dada por

$$W(t) = [W(0)^{1-q_{rel}} + (1 - q_{rel})K_{q_{rel}}t]^{\frac{1}{1-q_{rel}}}. \quad (6.12)$$

A curva $W(t)$ versus tempo (em escala log-log) tende a um comportamento linear (i.e., uma lei de potência), cuja inclinação permite obter o valor de q_{rel} . Para o caso logístico

usual ($z = 2$), foi encontrado $q_{rel} = 2.41 \pm 0.02$. Outros aspectos também foram detectados neste trabalho, como oscilações log-periódicas, mas não é relevante para nosso propósito.

O que chama atenção é que, o mesmo sistema dinâmico pode ser caracterizado por dois valores distintos de q , um deles menor que a unidade (q_{sen}) e outro maior que a unidade (q_{rel}). Surge a pergunta se existe relação entre eles. A resposta afirmativa é o objetivo da Seção seguinte.

6.2 Conexões entre as dinâmicas de sensibilidade e relaxação

Para estabelecer uma relação entre q_{sen} e q_{rel} (vide Ref. [153]), sempre no limiar do caos, vamos considerar um procedimento no qual N pontos são inicialmente colocados no interior de uma única célula do espaço de fases (dividido em W células de mesma medida), como os métodos baseados na sensibilidade às condições iniciais, e vamos acompanhar a evolução temporal da entropia $S_{q_{sen}}$, utilizando o valor de q_{sen} determinado pelos métodos anteriores. Em tempos suficientemente grandes ($t \rightarrow \infty$), $S_{q_{sen}}$ tende a um valor estacionário — este é o atrator do sistema para as condições particulares de W , N e a célula inicial escolhida. O caminho que o sistema percorre em direção ao seu atrator final, e inclusive o próprio atrator final, mudam com a mudança da célula inicial. Algumas células iniciais espalham os pontos muito rapidamente, aumentando $S_{q_{sen}}$ para valores muito mais elevados que aquele do atrator. $S_{q_{sen}}$ atinge um máximo, quando então relaxa para seu valor estacionário final (o atrator é alcançado por cima). Outras células iniciais espalham os pontos muito lentamente, e o pico na entropia não é tão elevado. Em alguns casos, pode nem mesmo haver um pico na evolução temporal da entropia, e o atrator é alcançado por baixo. Os estados finais, repetimos, não são os mesmos — dependem também da célula inicial. A Figura 6.1 ilustra o efeito da escolha da célula inicial.

O máximo que a entropia alcança fica em torno de 70–80% aproximadamente da entropia do estado equiprovável (Eq. (6.11)). A Figura 6.2 ilustra esse comportamento, para diversos valores de z e W .

Observamos a evolução temporal de $S_{q_{sen}}$ para aquelas células que geram maiores

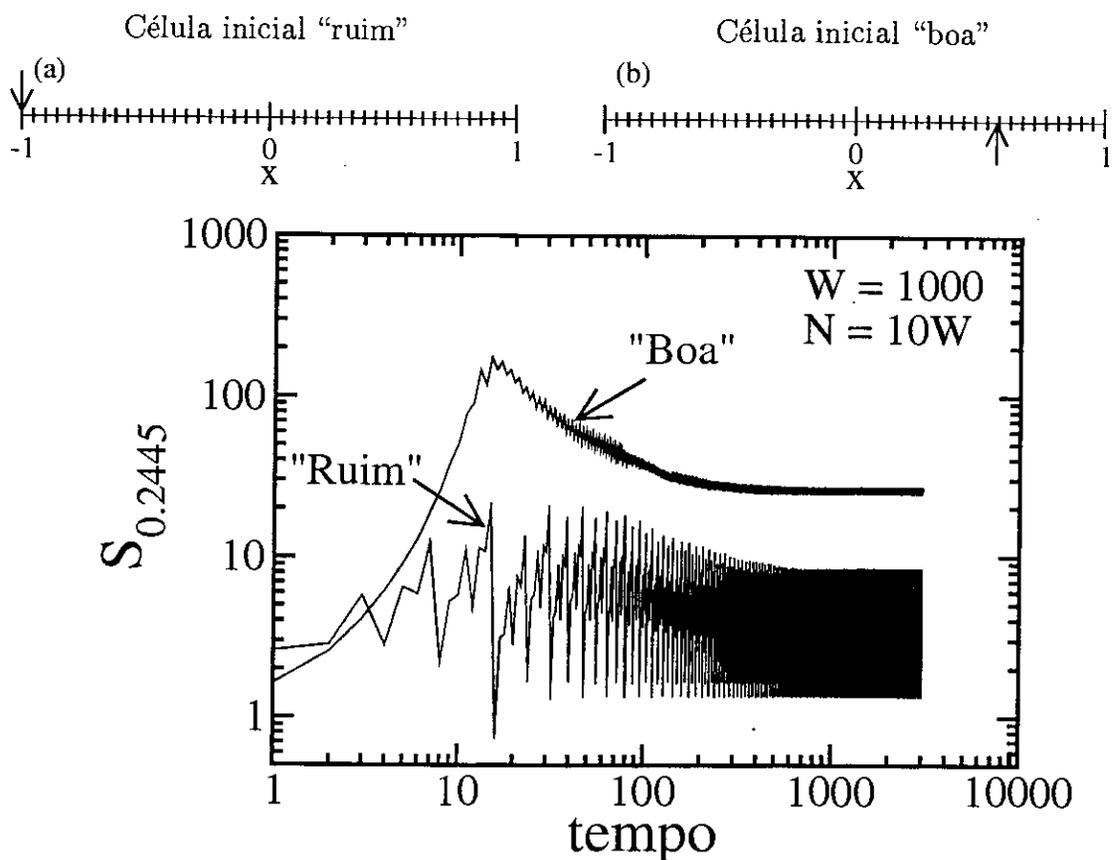


Figura 6.1: Efeito da escolha da célula inicial na evolução temporal de $S_{q_{sen}}$. Mapa logístico com $z = 2$ no limiar do caos $a = a_c = 1.401155189\dots$. Espaço de fases com $W = 1000$ divisões e $N = 10W$. Figs (a) e (b) mostram a posição da célula inicial; o número de divisões apresentado é ilustrativo (menor que W). Fig. (c) apresenta a evolução temporal de $S_{q_{sen}}$, com $q_{sen} = 0.2445$.

picos na entropia. O procedimento é repetido para valores crescentes de W e proporcionalmente crescentes valores de N . Adotamos $N = 10W$ (testamos $N = 100W$ e não verificamos alterações substanciais nos resultados, quando então adotamos $N = 10W$). Observemos inicialmente o mapa logístico tradicional ($z = 2$), na região de caos completamente desenvolvido ($a = 2$), e acompanhemos a evolução temporal de $S_{q_{sen}=1}$ para aquelas células que geram maiores picos na entropia. Neste caso de caos completamente desenvolvido, os picos na entropia são relativamente suaves e pouco perceptíveis. O valor de S_1 rapidamente alcança seu estado final, conforme podemos verificar na Figura 6.3. A Figura 6.4 ilustra o caso típico $z = 2$ no limiar do caos. Percebemos imediatamente que

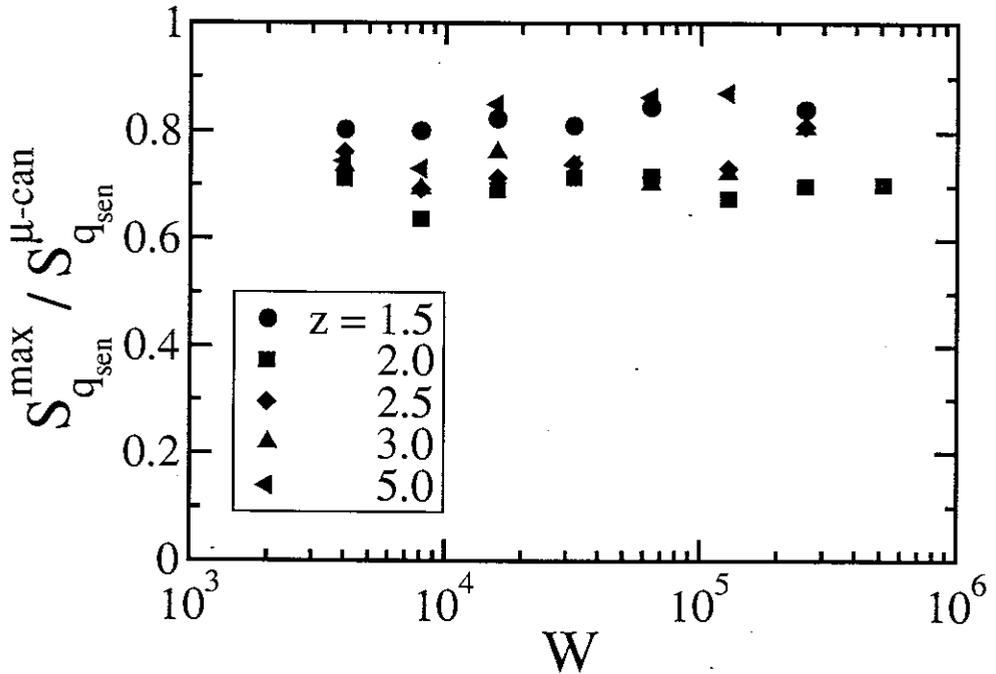


Figura 6.2: Máximo do pico da entropia em relação à entropia micro-canônica.

os *overshootings* no limiar do caos são bastante mais pronunciados que aqueles na região de caos completamente desenvolvido (sempre considerando inicialmente aquelas células aqui denominadas “boas”, i.e., aquelas que originam os maiores picos na entropia). Além disso, o tempo para alcançar o máximo na entropia é maior no limiar do caos do que no caos completamente desenvolvido.

Destas Figuras podemos retirar algumas conclusões importantes. Os tempos para alcançar o máximo na entropia são relativamente menores no caso do caos completamente desenvolvido (Fig. 6.3) do que no caso do limiar do caos (Fig. 6.4). Também os *overshootings* quando $a = 2$ são bastante menos pronunciados que aqueles do limiar do caos, e o valor estacionário da entropia S_1 é alcançado muito mais rapidamente quando $a = 2$ do que no limiar do caos. Isto é um reflexo de que os tempos de relaxação são exponencialmente rápidos no primeiro caso, enquanto obedecem a uma lei de potência no segundo. Também é imediato observar uma duplicidade de comportamentos: a fase crescente da entropia, nos tempos iniciais, e a fase decrescente, quando o sistema relaxa para seu es-

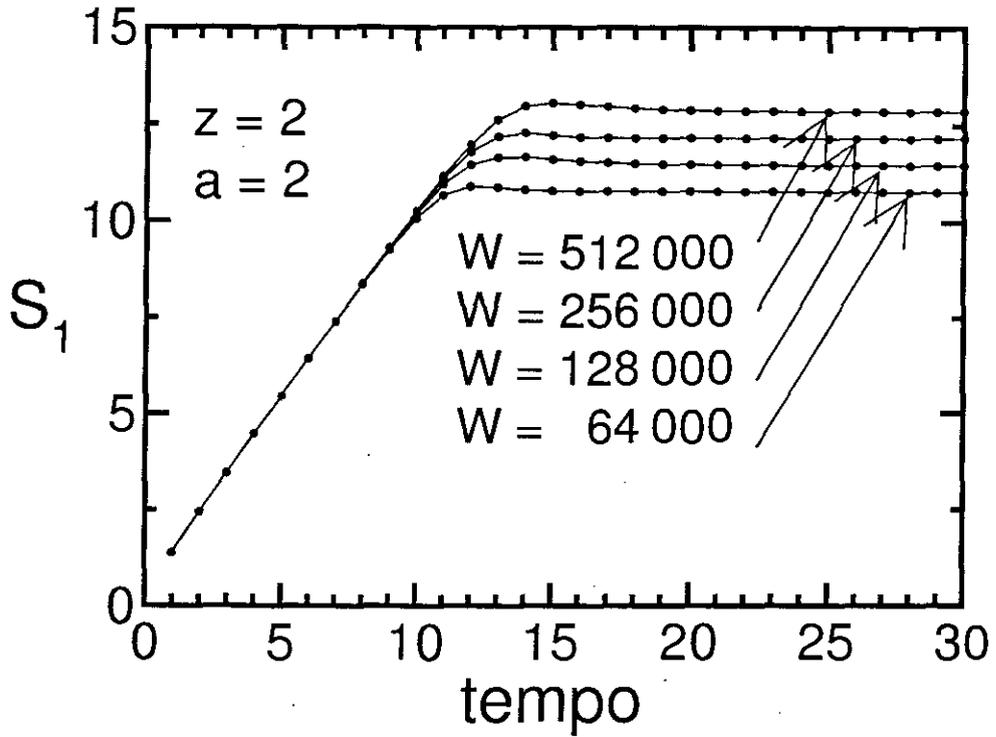


Figura 6.3: Evolução temporal da entropia S_1 para o mapa logístico ($z = 2$) na região de caos completamente desenvolvido ($a = 2$).

tado final. O lado crescente da curva diverge com W (notemos que nesta fase crescente as curvas estão colapsadas), o que indica que os limites $W \rightarrow \infty$ e $t \rightarrow \infty$ não comutam, i.e.:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{W \rightarrow \infty} \neq \lim_{W \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} . \quad (6.13)$$

Tomar primeiro o limite $W \rightarrow \infty$ corresponde à situação na qual o sistema permanece no estado de *mixing*, nunca alcançando um estado estacionário. É um estado de conhecimento completo (granulação infinitamente fina). Tomar primeiro o limite $t \rightarrow \infty$ corresponde à situação na qual o sistema vai alcançar um estado estacionário estacionário (seu atrator). Esta não comutação dos limites temporal e de granulação se assemelha a uma outra não comutação entre limites temporal e termodinâmico, conjecturada na Ref. [22] (vide Figura 7.2), que também tem sido corroborada numericamente (vide Capítulo 7). Em

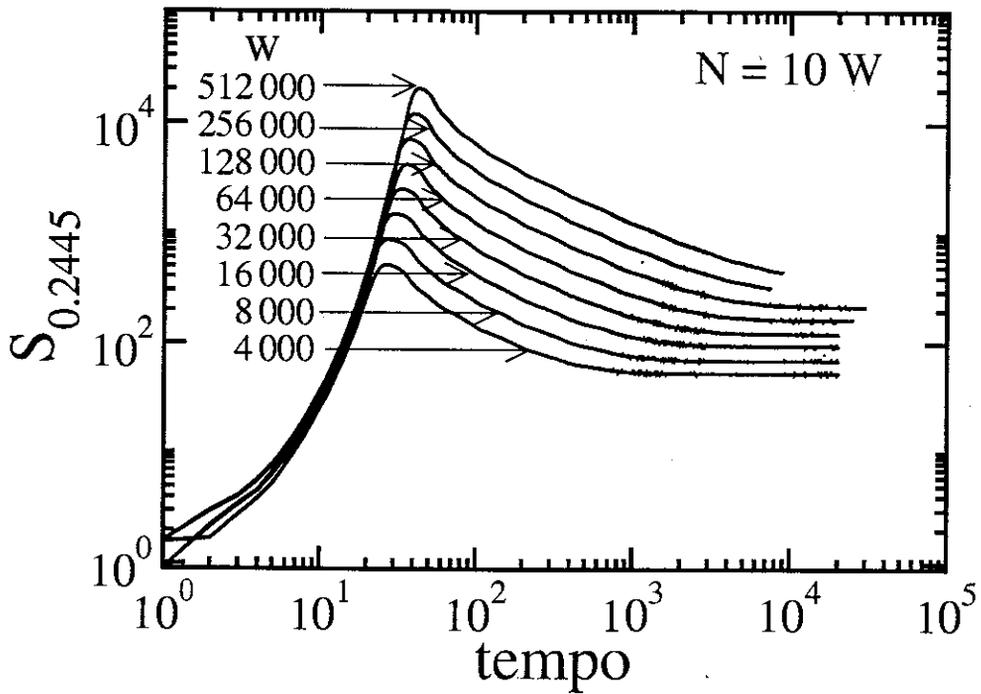


Figura 6.4: Evolução temporal da entropia $S_{q_{sen}}$ para o mapa logístico ($z = 2$) no limiar do caos.

sistemas caóticos, essas abordagens são equivalentes, os valores de q são auto-duais,

$$q_{sen} = q_{rel} = 1 \quad (\text{para sistemas completamente caóticos}). \quad (6.14)$$

Essa auto-dualidade foi possivelmente uma das responsáveis pela dificuldade na percepção que existem diferentes estatísticas, duais, para um mesmo sistema, e só foi possível ser evidenciada quando a Física se dedicou mais fortemente a sistemas no limiar do caos, que não satisfazem à hipótese ergódica.

A Figura 6.5 (a) mostra a divergência do pico da entropia, e também a divergência do seu valor final $S_{q_{rel}}(\infty)$, com W , ambas seguindo leis de potência, com inclinações diferentes. Isto implica que a região de decaimento de $S_{q_{rel}}$ ao longo da *ordenada* da Figura 6.4 é crescente com o tamanho do sistema. A Figura (b) mostra a divergência dos tempos de máximo da entropia e de chegada ao estado estacionário, mais uma vez obedecendo leis de potência, com inclinações diferentes. Similarmente, esta Figura mostra que a região de decaimento de $S_{q_{rel}}$ ao longo da *abscissa* da Figura 6.4 é também crescente,

i.e., a região de decaimento da entropia (desde o pico até o valor final) é crescente com W . Isto fica mais evidente na Figura 6.6, que é a mesma Figura 6.4, mas delimitando a região de decaimento.

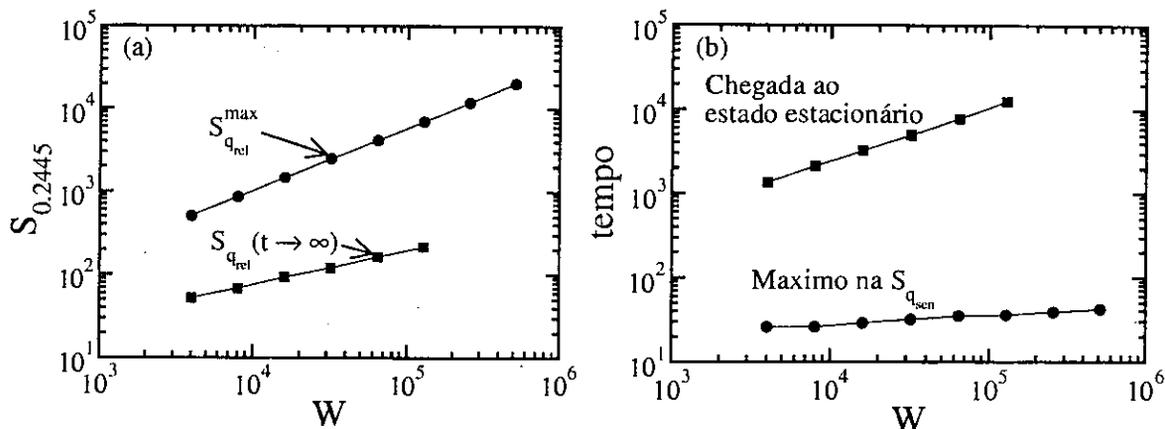


Figura 6.5: Crescimento da região de decaimento de $S_{q_{rel}}$ com W . (a) Crescimento de $S_{q_{rel}}^{max}$ (círculos) e $S_{q_{rel}}(\infty)$ (quadrados) com W . (b) Crescimento dos tempos de pico na entropia (círculos) e tempos de chegada ao estado estacionário (quadrados) com W . $S_{q_{rel}}(\infty)$ é estimado pela média na região estacionária. O tempo de chegada ao estado estacionário é estimado como sendo aquele no qual $S_{q_{rel}}(t_{estacionário}) = S_{q_{rel}}(\infty) + 10\sigma$, sendo σ o desvio padrão de $S_{q_{rel}}(\infty)$ na região estacionária. Em todos os casos temos leis de potência.

Observamos também a evolução temporal da variável

$$\Delta S_{q_{sen}}(t) \equiv S_{q_{sen}}(t) - S_{q_{sen}}(\infty) \quad (6.15)$$

A Figura 6.7 apresenta a variável $\Delta S_{q_{rel}}(t)$ para diferentes valores de W . Surge uma lei de potência, que se torna mais pronunciada para valores maiores de W . Estão presentes oscilações log-periódicas e são melhor detectadas para $z < 2$ (Figura 6.8). Estas oscilações também foram observadas na Ref. [152]. Tomamos regiões iniciais e regiões finais para melhor estimar a inclinação das curvas $\Delta S_{q_{rel}}(t)$, que estão indicadas na Figura. As inclinações (em log-log) são identificadas com $1/(q_{rel}(W) - 1)$ (com $q_{rel} > 1$). Verificamos que $q_{rel} = q_{rel}(W)$, i.e., a taxa na qual o sistema alcança seu estado final depende da *granulação* (W) adotada. A conexão entre os métodos baseados na sensibilidade às condições iniciais (q_{sen}) e os baseados na relaxação ao estado estacionário (q_{rel}) é estabelecida pela

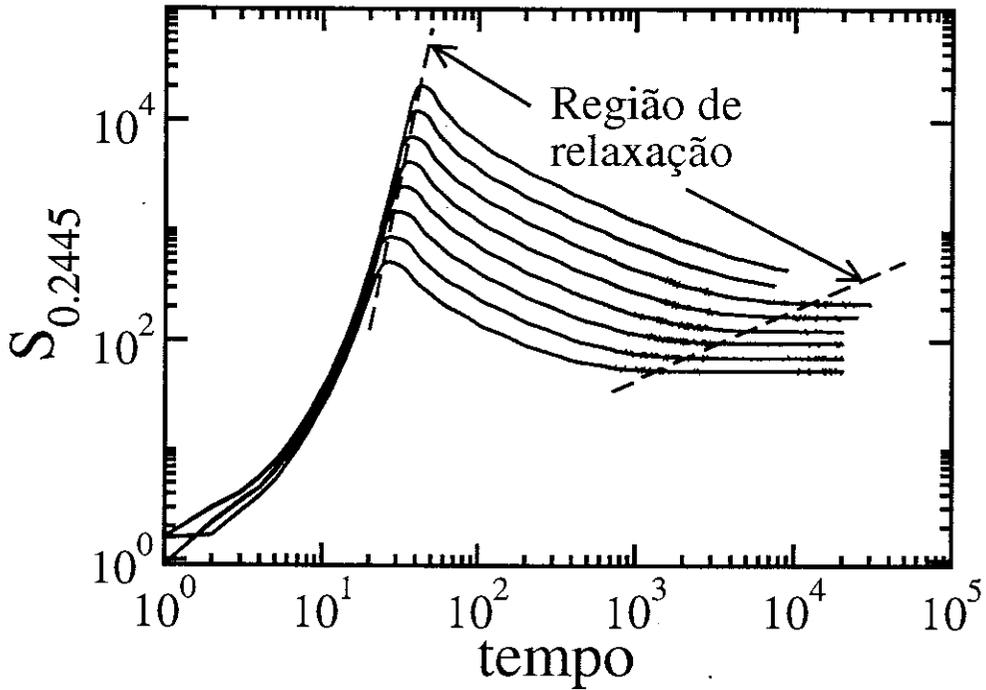


Figura 6.6: Evolução temporal da entropia, delimitando região de relaxação.

seguinte lei de escala de tamanho finito:

$$q_{rel}(\infty) - q_{rel}(W) \propto W^{-|q_{sen}|} \quad (6.16)$$

Esta Equação representa o ponto principal do presente Capítulo, e a Figura 6.9 ilustra sua validade, para diferentes valores de z . A extrapolação das curvas até a origem da Figura aponta para $q_{rel}(\infty)$; esses valores coincidem com aqueles obtidos pelo método (ii), baseado na relaxação (Ref. [152]), referido na Seção 6.1 anterior.

A Figura 6.10 mostra o coeficiente de correlação linear em função do expoente da lei de escala, Eq. (6.16), para os vários valores de z analisados. Ela confirma que o expoente coincide, dentro de imprecisões numéricas aceitáveis, com valores de q_{sen} obtidos através dos métodos baseados na sensibilidade às condições iniciais (p. ex., Ref. [146]).

Continuando nossa análise do mapa z -logístico, sabemos que os valores de q_{sen} e q_{rel} são dependentes de z (vide, p. ex., Ref.s [143] e [152], e Tabelas 6.1 e 6.2). Obtivemos

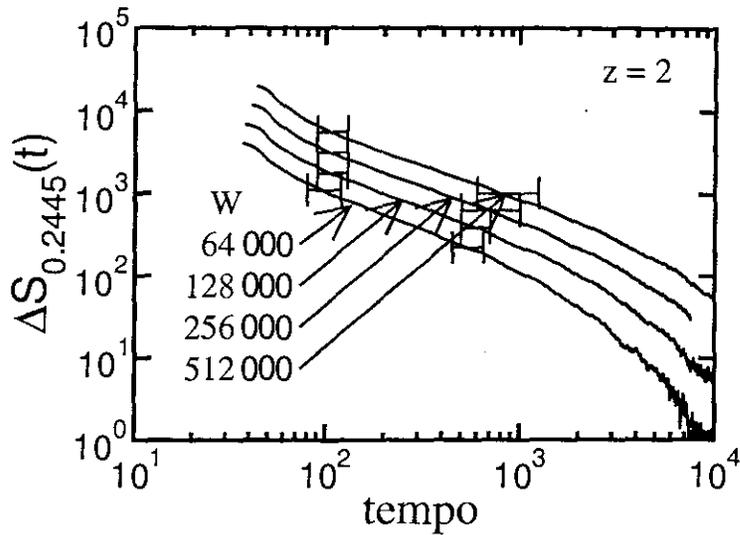


Figura 6.7: Evolução temporal do decaimento da entropia $\Delta S_{q_{rel}}$, para o caso logístico tradicional ($z = 2$), no limiar do caos. Para cada W , consideramos como região no regime lei de potência, aquela que vai do intervalo à esquerda até o intervalo à direita, mostrados (nestes intervalos, coeficiente de correlação superior a 0.99).

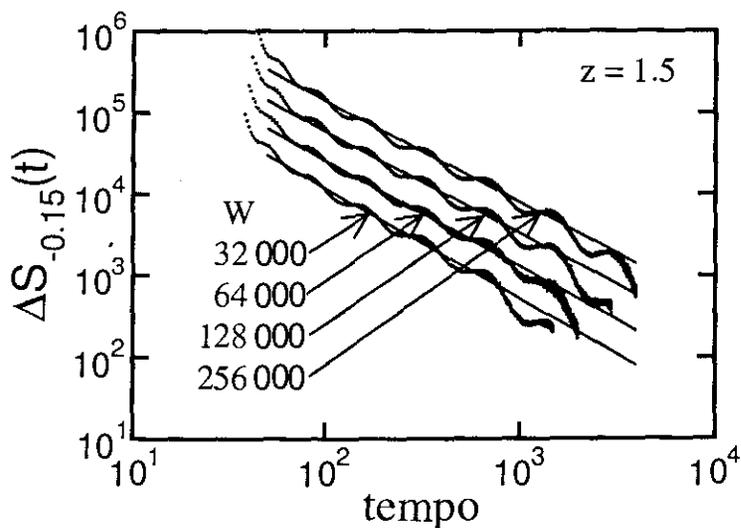


Figura 6.8: Oscilações log-periódicas em $\Delta S_{q_{sen}}$ para $z = 1.5$ ($q_{sen} = -0.15$). Linhas retas indicam regiões de comportamento tipo lei de potência, abatidas, naturalmente, as oscilações.

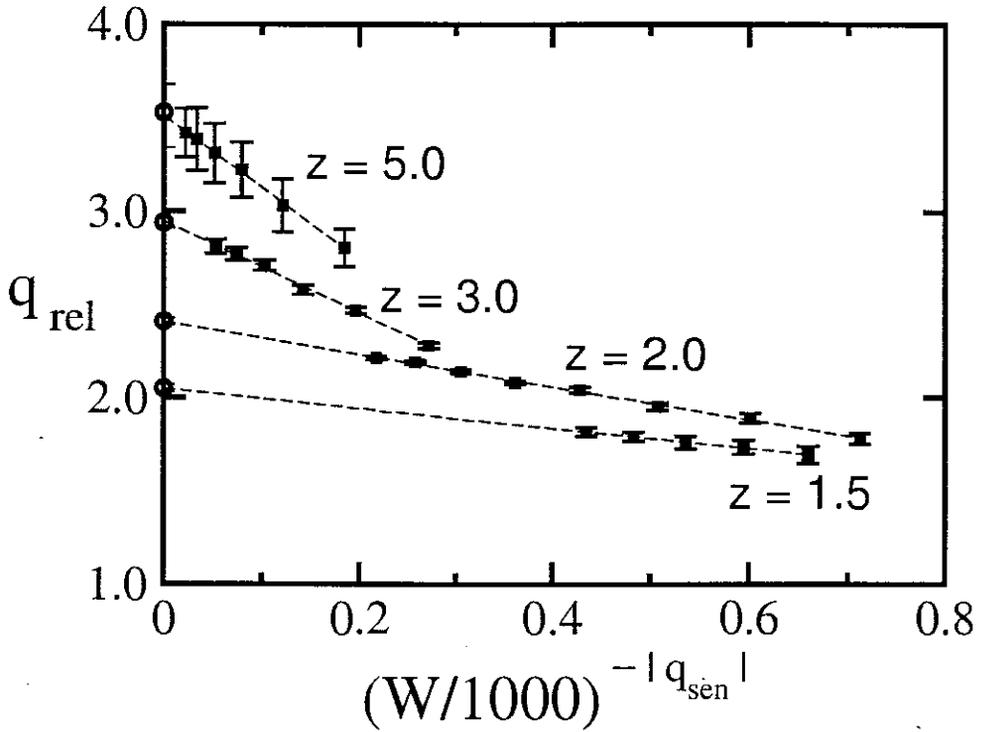


Figura 6.9: q_{rel} em função da granulação (W), para alguns valores de z (quadrados). As linhas pontilhadas correspondem ao ajuste dos pontos, extrapoladas para $q_{rel}(\infty)$ (círculos, valores reportados em [152]). A abscissa aparece na escala $(W/1000)^{-|q_{sen}|}$ (em vez de $W^{-|q_{sen}|}$) para melhor visualização.

empiricamente as seguintes correlações:

$$q_{sen}(z) = 0.72 - 1.525/z^{1.7} \quad (z \geq 1.75), \quad (6.17)$$

$$q_{rel}(W \rightarrow \infty, z) = 4/3 + 1.077(z - 1)^{0.58} \quad (z \leq 3.0). \quad (6.18)$$

Com isso temos os valores limite:

$$q_{sen}(z \rightarrow \infty) \rightarrow 0.72, \quad (6.19)$$

$$q_{rel}(W \rightarrow \infty, z \rightarrow 1) = 4/3. \quad (6.20)$$

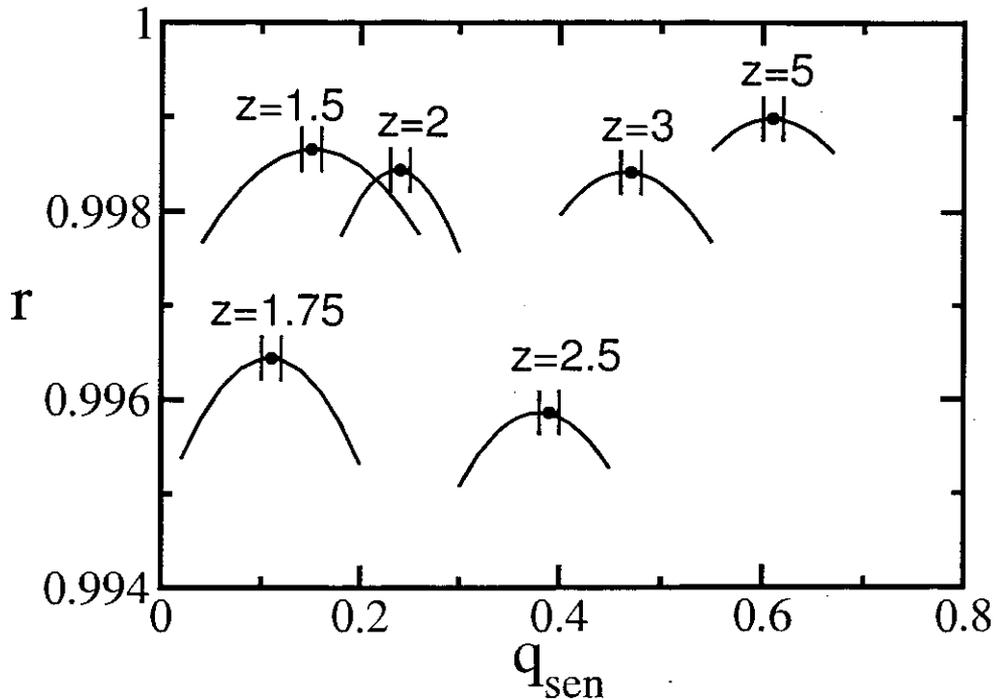


Figura 6.10: Coeficiente de correlação linear em função do expoente da lei de escala, Eq. (6.16).

A Figura 6.11 ilustra a adequação destas correlações. A Figura 6.12 apresenta o coeficiente de correlação linear para as Equações (6.17) e (6.18) variando as suas potências (valores ótimos: 1.7 na primeira e 0.58 na segunda).

Seguindo a mesma linha de trabalho, aplicamos o método para o mapa de Hénon [154], para verificar a existência da lei de escala, Equação (6.16) [155, 156].

O mapa de Hénon é bi-dimensional:

$$\begin{cases} x_{t+1} = 1 - ax_t^2 + y_t \\ y_{t+1} = bx_t \end{cases} \quad (6.21)$$

e apresenta dois parâmetros, a e b . Quando $b = 0$, o mapa se reduz ao logístico, e quando $b = 1$, o mapa se torna conservativo (para $0 \leq b < 1$ o mapa é dissipativo). Nos ativemos a pequenos valores de b (tipicamente $b \leq 0.2$). Estudos sobre este mapa, seguindo os três métodos baseados na sensibilidade às condições iniciais [157] indicaram valor de q_{sen} idêntico ao do mapa logístico ($q_{sen} = 0.2445\dots$); com isso podemos considerá-lo como

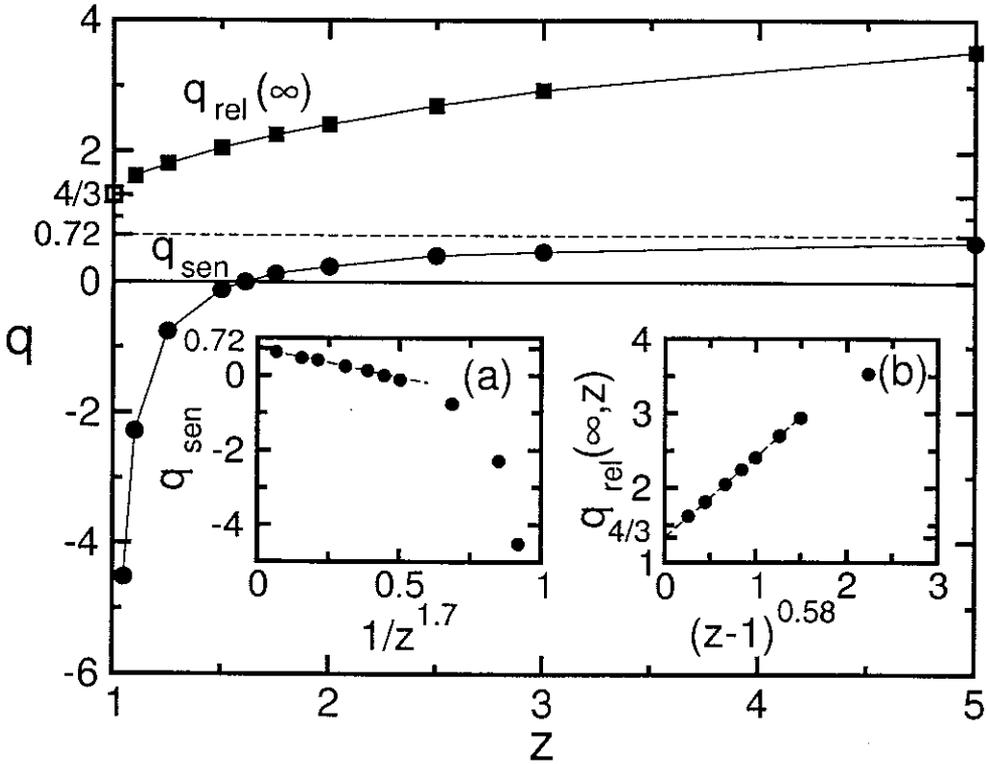


Figura 6.11: $q_{rel}(\infty)$ e q_{sen} em função de z . Detalhe (a): extrapolação de q_{sen} para $z \rightarrow \infty$; Detalhe (b): extrapolação de $q_{rel}(W \rightarrow \infty)$ para $z \rightarrow 1$.

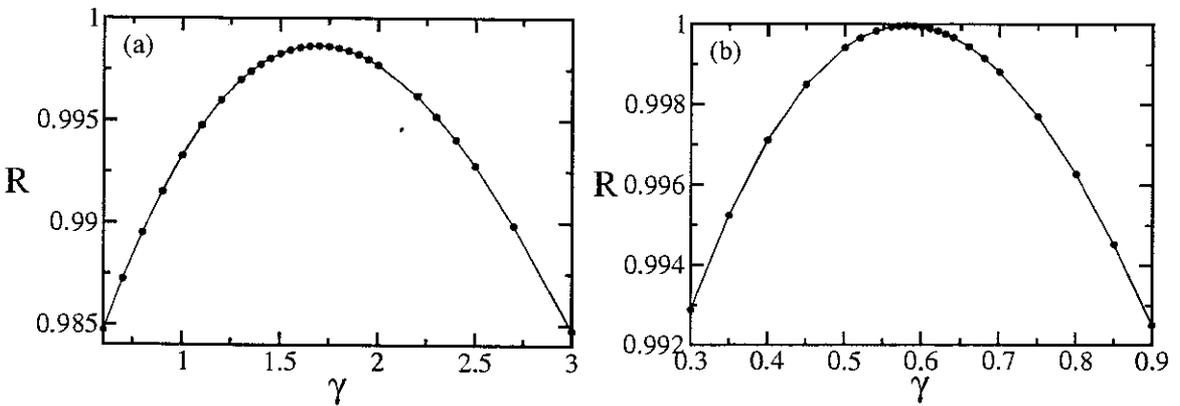


Figura 6.12: Coeficiente de correlação para a dependência de $q_{sen}(z)$ e $q_{rel}(\infty, z)$ em z . (a) $q_{sen}(z \rightarrow \infty) - q_{sen}(z) \propto 1/z^\gamma$; (b) $q_{rel}(W \rightarrow \infty, z) - q_{rel}(W \rightarrow \infty, z \rightarrow 1) \propto (z - 1)^\gamma$. Evidentemente γ é um parâmetro *mudo*, i.e., os γ das Figuras (a) e (b) são distintos.

pertencente à classe de universalidade logística. A análise deste sistema segundo o método (ii), baseado na taxa de relaxação para o atrator [155] indica que $q_{rel}(\infty) = 2.41 \dots$,

novamente mesmo valor para o caso logístico. A Figura 6.13 ilustra este resultado.

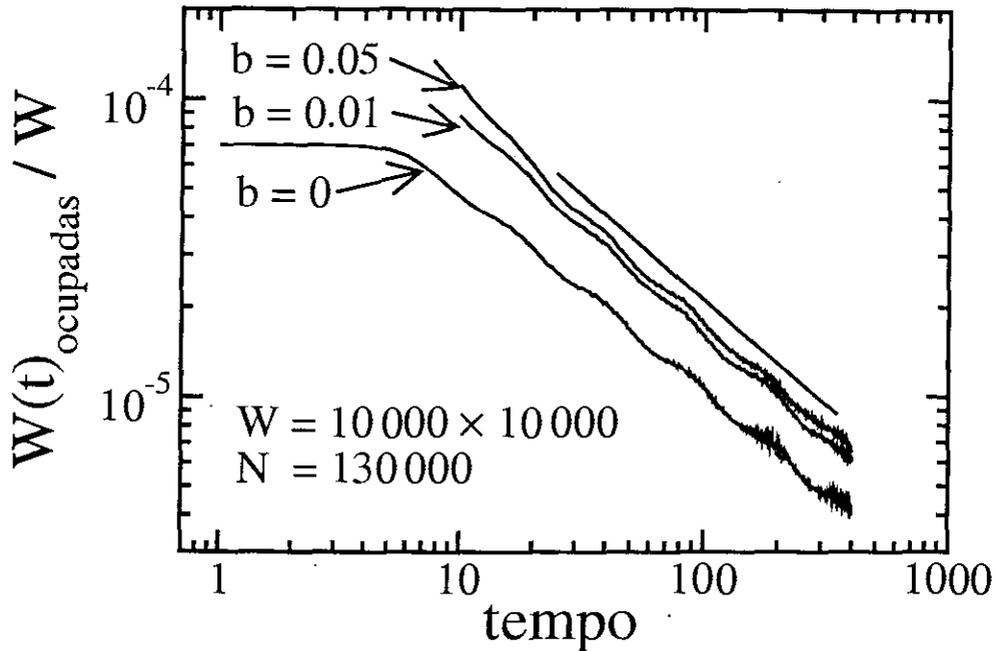


Figura 6.13: Relaxação para o atrator, para o mapa de Hénon. A inclinação (em módulo) das curvas é aproximadamente 0.71, o que origina $q_{rel}(\infty) = 2.41 \dots$

O próximo passo é empregar o mesmo procedimento, para verificar a dependência de q_{rel} com a granulação e testar, com outro sistema, a validade da lei de escala, Equação (6.16). O espaço de fases agora tem $W = W_x \times W_y$ células. Utilizamos $W_x = W_y$ e, por limitações computacionais, $N = W$, tendo verificado previamente (para casos com poucas células) que os desvios em relação a $N = 10W$, como utilizado no caso z -logístico, podem ser desprezados. Embora a precisão não seja a mesma do caso uni-dimensional (novamente por limitações computacionais), é possível verificar, aproximadamente, também para este mapa, a existência de uma lei de escala, mas quando observamos o *sub-espaço logístico* (eixo x)⁵. Os coeficientes de correlação lineares ficam acima de 0.99. A Figura 6.14 apresenta os resultados. Esta Figura indica que o aumento de b provoca uma diminuição de $q_{rel}(\infty)$ em relação ao seu valor para o mapa logístico ($b = 0$), em contradição com o que indica a Figura 6.13. Entretanto as imprecisões numéricas dos resultados para $b \neq 0$

⁵Inicialmente, em [155], não foi possível observar que a lei de escala é observada apenas no sub-espaço logístico; naquele trabalho, consideramos todo o espaço de fases com W células.

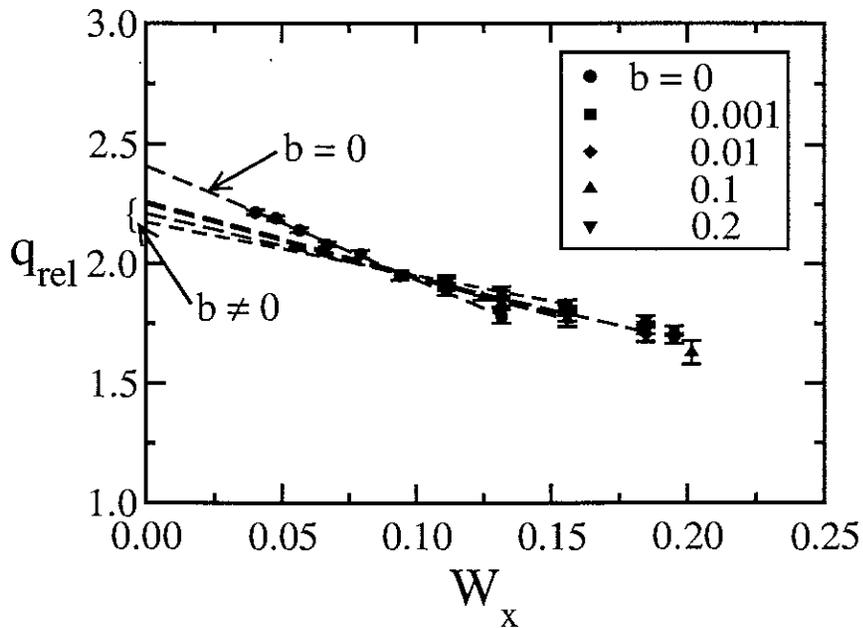


Figura 6.14: Lei de escala relacionando q_{rel} e q_{sen} para o mapa de Hénon. Note que a abscissa tem W_x , que representa a projeção do espaço de fases no sub-espaço logístico.

não permitem assegurar que os valores extrapolados na Figura 6.14 sejam acuradamente precisos.

Outra conclusão é que a lei de escala é verificada (dentro de faixas de imprecisão numérica) com o mesmo expoente $q_{sen} = 0.2445$, para os valores de b analisados (incluindo o caso logístico), confirmando resultados prévios [157]. Para obter resultados mais acurados, necessitaríamos de computadores com capacidade de memória (e eventualmente velocidade de processamento) maior do que os que dispusemos para este trabalho⁶. Outra possibilidade seria a utilização de um número menor de pontos $W_x < N < W$ (uma vez que estamos interessados no sub-espaço x). Para tanto, naturalmente, é necessário avaliar se essa redução não compromete a validade dos resultados. Isso permitiria calcular sistemas com granulações mais finas, aumentando a confiança na extrapolação para granulação infinitamente fina.

⁶O computador de maior memória RAM que utilizamos dispõe de cerca de 2.5 Gbytes.

Tabela 6.1: Parâmetros do mapa z -logístico. Valores de q_{sen} retirados de [146]; valores de $q_{rel}(\infty)$ encontrados pelo presente método (erros obtidos por regressão linear).

z	a_c	q_{sen}	$q_{rel}(\infty)$
1.50	1.2955099...	-0.15 ± 0.01	2.05 ± 0.02
1.75	1.3550607...	0.11 ± 0.01	2.25 ± 0.08
2.00	1.401155189...	0.24 ± 0.01	2.41 ± 0.02
2.50	1.4705500...	0.39 ± 0.01	2.75 ± 0.03
3.00	1.5218787...	0.47 ± 0.01	2.95 ± 0.04
5.00	1.6455339...	0.61 ± 0.01	3.51 ± 0.17

Tabela 6.2: Parâmetros do mapa de Hénon. x_{min} , x_{max} , y_{min} e y_{max} representam os limites do espaço de fases ao longo dos eixos x e y , respectivamente.

b	a_c	x_{min}	x_{max}	y_{min}	y_{max}
0	1.40115518909...	-1	1	0	0
0.001	1.39966671601417...	-1.05	1.05	-0.0015	0.0015
0.005	1.3937355854387...	-1.05	1.05	-0.015	0.015
0.01	1.38637288934791...	-1.05	1.05	-0.015	0.015
0.1	1.263595658290796...	-1.1	1.1	-0.10	0.12
0.2	1.1490464894722...	-1.179	1.179	-0.236	0.236
0.3	1.0580490493270...	-1.179	1.179	-0.236	0.236

6.3 Outros exemplos indicativos da dependência de q_{rel} da granulação

Esta seção se dedica a apresentar, sucintamente, três exemplos de sistemas que apresentam dependência da granulação sobre o valor de q_{rel} . Não são sistemas de baixa dimensionalidade, mas consideramos relevante colocá-los, pois esse fenômeno da dualidade de abordagens e de valores de q pode ser bem mais amplo, i.e., pode estar presente em um número muito maior de sistemas, e não apenas em sistemas dissipativos de baixa dimensionalidade, que vimos tratando neste Capítulo. Esta interpretação, como também os exemplos, foram originalmente publicados em [39].

(i) Aniquilação elétron-pósitron

Na Ref. [158] (vide também em [159]), foram analisadas distribuições de momentos

transversais na aliquilação elétron-pósitron de experimentos realizados no CERN. Os valores de q_{rel} dependem da energia de colisão dos centros de massa E , que exerce um papel similar a W nos mapas anteriormente discutidos, uma vez que a granulação é cada vez mais fina para maiores energias. A Figura 6.15 apresenta, de uma forma re-arrumada, os dados da sua Tabela I. Os dados obedecem à relação empírica

$$q_{rel}(E) = 1.301 - 1.046E^{-1/2}. \quad (6.22)$$

Assim temos $q_{rel}(\infty) = 1.3$ e $q_{sen} = 1/2$. Evidentemente são bem-vindos possíveis experimentos que verifiquem essas conclusões.

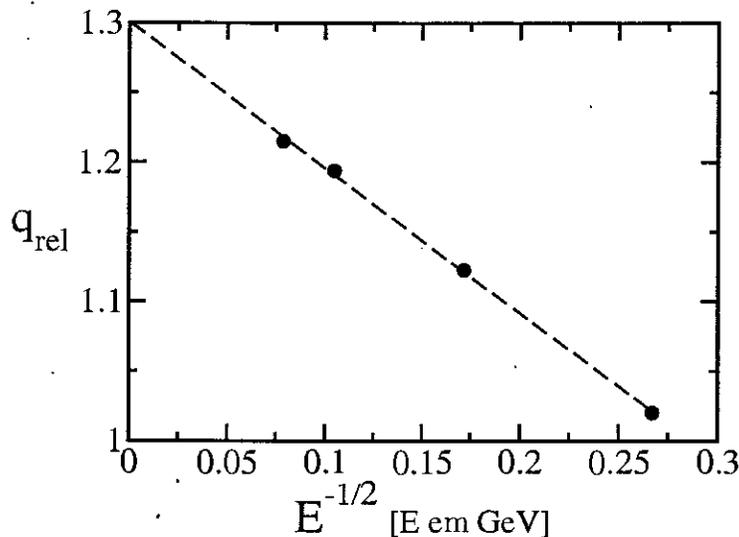


Figura 6.15: q_{rel} em função da energia (*granulação*) no experimento de aniquilação elétron-pósitron. Coeficiente de correlação do ajuste: $r = 0.9995$.

(ii) Turbulência completamente desenvolvida

A análise da distribuição de diferenças de velocidades em um sistema com turbulência completamente desenvolvida, num experimento de Couette-Taylor, é um exemplo de sistema que tem sido tratado dentro do formalismo da mecânica estatística não-extensiva através de duas abordagens, uma com valores do parâmetro entrópico $q > 1$, e outra com $q < 1$, ambas demonstrando sucessos impressionantes. Consideremos inicialmente os

experimentos realizados e apresentados na Ref. [160]. Foram analisados quatro diferentes valores do Número de Reynolds (Re), e milhões de distâncias r medidas experimentalmente, expressas em unidades do comprimento de Kolmogorov η . A Figura 6.16 (a) corresponde à Figura 3 da Ref. [160]⁷. O efeito do número de Reynolds pode ser eliminado através do colapso das curvas, utilizando como abscissa a variável

$$x = \{[\ln(r/\eta)]/[\ln(Re)]^{7/4}\}^{0.37}. \quad (6.23)$$

Em realidade, o colapso é obtido apenas com a escala $[\ln(r/\eta)]/[\ln(Re)]^{7/4}$. O expoente 0.37 ± 0.1 torna as curvas aproximadamente lineares na região intermediária de distâncias: faz o papel de q_{sen} na Equação (6.16). Esta região intermediária (agora linearizada), quando extrapolada para $r/\eta \rightarrow 0$ (granulação infinitamente fina), obtém $q_{rel}(1/r \rightarrow \infty) \simeq 1.45$. Este valor é bastante próximo de $3/2$, valor também estimado por Beck para turbulência Lagrangeana [161]. Por outro lado, $q_{sen} = 0.37$ coincide com valor estimado em um dos casos analisados pelos Arimitsu [162, 163], em outra abordagem para o mesmo problema, na avaliação de diferenças de velocidades. A Figura 6.16 (b) ilustra os resultados.

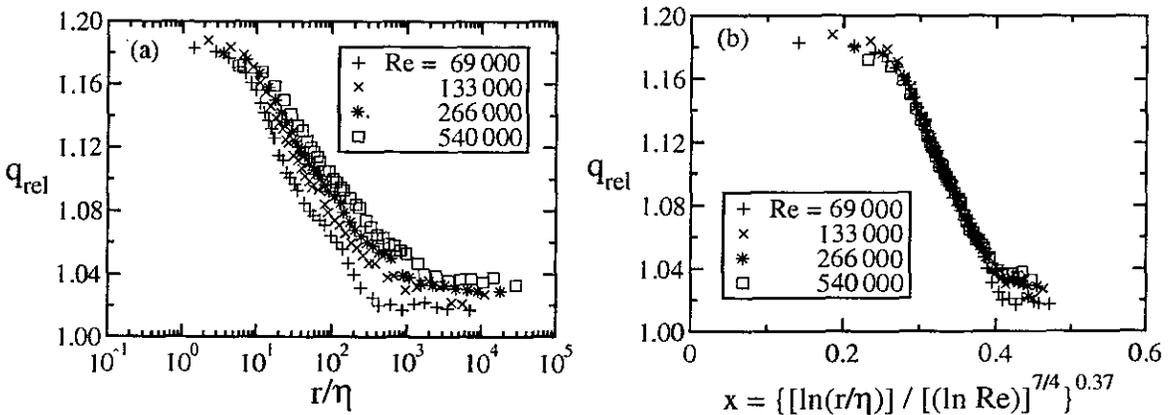


Figura 6.16: q_{rel} em função de r/η e Re para experimento de Couette-Taylor. (a) Dados da Fig. 3 da Ref. [160]; (b) Curvas colapsadas, com região intermediária aproximadamente linearizada.

⁷Os dados foram gentilmente cedidos por Christian Beck, pelo que somos gratos.

(iii) Dinâmica do sistema Hénon-Heiles no ponto de sela

Este exemplo é um sistema *conservativo*, embora esteja incluído neste capítulo dedicado a sistemas dissipativos. A dinâmica do sistema Hénon-Heiles no ponto de sela foi estudada na Ref. [164]. O seu parâmetro de controle k exerce um papel similar ao Número de Reynolds, portanto, $k \rightarrow \infty$ corresponde a uma granulação infinitamente fina. Os dados apresentados na sua Tabela I são re-arrumados conforme a Figura 6.17, evidenciando, mais uma vez, a lei de escala, Eq. (6.16). (O parâmetro γ , da sua Tabela I, está relacionado a uma medida universal do caos associado à dinâmica do centro de sela, num regime altamente não integrável, conforme argumentam os autores. Identificamos $\gamma = 1/(q_{rel} - 1)$. Para maiores detalhes, vide [164].) Obtivemos $q_{rel}(\infty) \simeq 2.81$ e $q_{sen} \simeq 0.35$. Trabalhos adicionais que possam, ou não, corroborar estes resultados são bem-vindos.

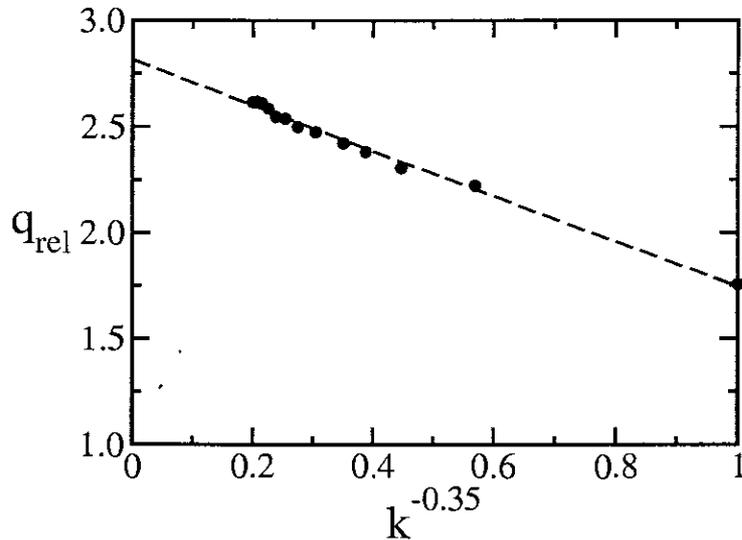


Figura 6.17: q_{rel} em função da granulação para o sistema Hénon-Heiles, no ponto de sela.

Capítulo 7

Sistemas conservativos de alta dimensionalidade

Este Capítulo é dedicado ao tratamento computacional de dois sistemas Hamiltonianos com muitos graus de liberdade e com interações de longo alcance. Seu objetivo é verificar uma conjectura feita por C. Tsallis em 1999 [22] a respeito da natureza do equilíbrio termodinâmico. A Seção 7.1 apresenta a conjectura, e as Seções 7.2 e 7.3 apresentam resultados computacionais baseados em dois modelos: rotores clássicos anisotrópicos acoplados e gás do tipo Lennard-Jones, respectivamente. O primeiro apresenta de modo claro o comportamento contido na conjectura. O segundo apresenta anomalias em relação ao formalismo de Boltzmann-Gibbs, mas, possivelmente por dificuldades computacionais, a parte central da conjectura não foi verificada nem desmentida.

Sistemas Hamiltonianos representam o coração da mecânica estatística. Eram eles que Boltzmann tinha em mente [22]. Encontrar anomalias neste tipo de sistema, especialmente nos clássicos (i.e., sem efeitos quânticos ou relativísticos) significa buscar os limites de validade da própria mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs. Como usual em ciência, o essencial é saber fazer simplificações judiciosas nos modelos, de modo que eles reflitam os aspectos essenciais do comportamento da natureza e negligenciem os detalhes acidentais. Com isso, o problema (que usualmente é por demais complexo) pode se tornar tratável, seja analiticamente ou numericamente. Uma vez conhecidos os componentes essenciais, pode-se, com muito mais facilidade, fazer-se adaptações naqueles modelos, de modo a levar em conta aquelas simplificações que haviam sido negligenciadas no processo de idealização,

melhorando a concordância com os experimentos.

O modelo de rotores clássicos (que tratamos na Seção 7.2) é um desses casos paradigmáticos, no que se refere às interações de longo alcance. Por isso, tem sido grande e crescente o número de trabalhos baseados neste modelo. Um gás, sem dúvida, é também um dos mais paradigmáticos modelos em ciência — a própria mecânica estatística muito deve ao gás ideal. A atenção que este modelo tem recebido na literatura tem sido em grau menor que o modelo de rotores por limitações computacionais.

É sabido desde muito que sistemas com interações de longo alcance apresentam problemas, quando abordados com a mecânica estatística, e efeitos de tamanho finito devem ser considerados. Dentre as abordagens destes sistemas, destacamos os trabalhos de Hill [165], Gross [166] e do grupo de Viena, Thirring e Posch [167] (e referências lá contidas). Entretanto, nenhum destes trabalhos focalizaram os estados meta-estáveis, ou quase-estacionários, objetivo central do presente Capítulo.

7.1 Violação fraca e forte de Boltzmann-Gibbs

O equilíbrio termodinâmico traz imbutido dois conceitos sutis¹. Equilíbrio diz respeito ao tempo. As propriedades que caracterizam o estado de um sistema em equilíbrio são constantes de movimento. Admite-se que a energia de um sistema em equilíbrio se distribui em seus graus de liberdade do modo estatisticamente mais provável. Termodinâmica diz respeito a sistemas macroscópicos, i.e. sistemas com número suficientemente grande de graus de liberdade de modo que medidas realizadas sejam médias sobre eles. A esmagadora maioria dos graus de liberdade de um sistema termodinâmico, ou melhor dizendo, dos graus de liberdade de seus elementos constituintes, desaparece no processo de média. Entretanto, alguns (usualmente poucos) graus de liberdade sobrevivem ao processo de média macroscópica, emergindo como comportamentos coletivos. Alguns exemplos dessas coordenadas sobreviventes são o volume total, momento linear total, momento de dipolo, energia interna, temperatura [32].

¹Não pretendemos dar aqui um tratamento teórico matemático rigoroso ou abordar várias implicações destes conceitos. O objetivo é introduzir a conjectura, de modo a localizar a abordagem computacional apresentada nas Seções seguintes. O conteúdo desta Seção não é original, vide Ref. [22].

O estado de equilíbrio termodinâmico é alcançado através de dois limites: temporal e de número de partículas. A abordagem computacional de dinâmica molecular (que realizamos nos exemplos apresentados nas Seções 7.3 e 7.2) objetiva avaliar propriedades termodinâmicas aproximando estes limites. Quando temos sistemas com interações de curto alcance, a ordem destes limites é irrelevante,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} f(t, N) = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} f(t, N), \quad (7.1)$$

onde $f(t, N)$ é alguma propriedade macroscópica do sistema. Isto dá origem a outra característica atribuída ao equilíbrio termodinâmico, que é a independência de sua história — o estado de equilíbrio é univocamente definido, não importando como tenha sido alcançado.

A conjectura à qual estamos nos referindo (e, veremos a seguir, tem sido observada em alguns modelos computacionais) diz que quando estão presentes interações de longo alcance, pode ocorrer convergência não uniforme e a Equação (7.1) deixa de ser válida de um modo geral:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} f(t, N) \neq \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} f(t, N). \quad (7.2)$$

De imediato segue que o estado final depende de sua história (a ordem dos limites). Para ilustrar como o estado termodinâmico fica alterado, consideremos um sistema Hamiltoniano com interações entre pares,

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N p_i^2 + \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N v(r_{ij}), \quad (7.3)$$

onde m é a massa de uma partícula, $\{p_i, r_i\}$ são o momento linear e a posição da partícula i (formando um par canonicamente conjugado), e $r_{ij} \equiv |r_i - r_j|$. Vamos admitir que o potencial $v(r_{ij})$ não apresente singularidade na origem (a característica que nos interessa aqui é o comportamento a longas distâncias). A interação atrativa depende da distância na forma

$$v(r) \propto \frac{1}{r^\alpha}. \quad (7.4)$$

No caso tri-dimensional ($d = 3$), $\alpha = 6$ corresponde ao termo atrativo de Lennard-Jones, $\alpha = 3$ é típico das interações dipolo-dipolo, $\alpha = 1$ equivale a gravitação newtoniana, $\alpha = 0$ corresponde à aproximação de campo médio, onde cada partícula interage com cada uma das demais com a mesma intensidade, independente de sua distância relativa — podemos dizer que estas interações são de alcance infinito. O limite $\alpha \rightarrow \infty$, fica

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{1}{r^\alpha} = \begin{cases} 1, & \text{se } r = 1, \\ 0, & \text{se } r > 1. \end{cases} \quad (7.5)$$

Se o modelo permitir distâncias unitárias (p. ex., posições em um retículo, como veremos na Seção 7.2), $\alpha \rightarrow \infty$ corresponde a interações entre primeiros vizinhos. Se o modelo não permitir $r = 1$ (como tipicamente ocorre nas distâncias intermoleculares de um gás, distâncias estas normalizadas pelo diâmetro de uma partícula, Seção 7.3), $\alpha \rightarrow \infty$ corresponde a um sistema sem interações, i.e., um gás ideal.

Uma quantidade típica nos cálculos de mecânica estatística é

$$\int_1^\infty dr r^{d-1} r^{-\alpha}, \quad (7.6)$$

onde a distância r está expressa em unidades de comprimento característico do problema (d é a dimensionalidade espacial). Esta integral converge se $\alpha > d$. Quando esta condição ocorre, o potencial é dito de *curto alcance*. Se $0 \leq \alpha \leq d$, a integral diverge (o potencial é dito de *longo alcance*) e o tratamento estatístico requer que se leve em consideração o tamanho finito do sistema. Definindo a quantidade [168]

$$\begin{aligned} N^* &\equiv d \int_1^{N^{1/d}} dr r^{d-1} r^{-\alpha} \\ &= \frac{N^{1-\alpha/d} - 1}{1 - \alpha/d} \\ &= \ln_{\alpha/d} N, \end{aligned} \quad (7.7)$$

e ainda ([22])

$$\tilde{N} \equiv N^* + 1 = \frac{N^{1-\alpha/d} - \alpha/d}{1 - \alpha/d}, \quad (7.8)$$

temos o seguinte comportamento assintótico no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$

$$\tilde{N} \sim \begin{cases} \frac{\alpha/d}{\alpha/d-1} & \text{se } \alpha/d > 1, \\ \ln N & \text{se } \alpha/d = 1, \\ \frac{N^{1-\alpha/d}}{1-\alpha/d} & \text{se } 0 \leq \alpha/d < 1. \end{cases} \quad (7.9)$$

A Figura 7.1 ilustra o comportamento de \tilde{N} com N e α/d . \tilde{N} é monótona crescente com N , para um valor fixo de $\alpha/d \geq 0$. Quando $\alpha/d > 1$, \tilde{N} apresenta uma assíntota superior. Para um valor fixo de N , \tilde{N} é monótona decrescente com α/d . Se $\alpha/d \rightarrow \infty$ (sistemas não interagentes ou fracamente interagentes), $\tilde{N} \rightarrow 1$, e se $\alpha/d \rightarrow 0$ (interações de alcance infinito), $\tilde{N} \sim N$. A assíntota vertical em $\alpha/d = 1$ (Figura (b)) representa a separação entre os sistemas com interações de longo e curto alcance.

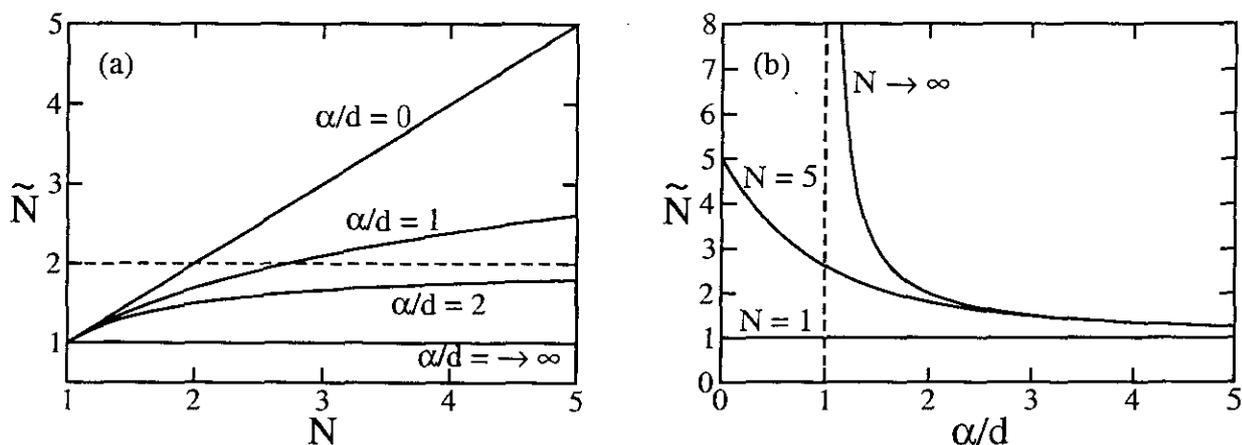


Figura 7.1: Função de escala $\tilde{N} = \tilde{N}(N, \alpha/d)$. (a) \tilde{N} versus N , para valores típicos de α/d ; (b) \tilde{N} versus α/d para valores típicos de N .

\tilde{N} é um fator de escala de tamanho finito. Vejamos como ele é introduzido no formalismo (conforme Ref. [22]). Consideremos o caso padrão, $\alpha/d > 1$. A energia livre de Gibbs G é dada pela relação de Euler

$$\frac{G}{N} = \frac{U}{N} - T \frac{S}{N} + p \frac{V}{N}, \quad (7.10)$$

sendo U a energia interna total, S a entropia total, V o volume total, T a temperatura e p a pressão. No limite $N \rightarrow \infty$, as grandezas G , U , S e V escalam com N (por isto denominadas extensivas), enquanto T e p são independentes de N (variáveis intensivas).

Assim, as variáveis densitárias são independentes do tamanho do sistema e assumem valores finitos no limite termodinâmico:

$$g = u - Ts + pv, \quad (7.11)$$

com $g \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} G/N$ e similarmente para u , s e v . Consideremos agora o caso $0 \leq \alpha/d \leq 1$. No limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, a Equação anterior não pode ser escrita, pois G e U divergem mais rapidamente que N . Entretanto, se reescrevermos a relação de Euler na forma

$$\frac{G}{N\tilde{N}} = \frac{U}{N\tilde{N}} - \frac{T}{\tilde{N}} \frac{S}{N} + \frac{p}{\tilde{N}} \frac{V}{N}, \quad (7.12)$$

estas novas variáveis densitárias reescaladas assumem valores finitos (esta é a conjectura):

$$\tilde{g} = \tilde{u} - \tilde{T}s + \tilde{p}v, \quad (7.13)$$

onde, naturalmente, $\tilde{g} \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{G}{N\tilde{N}}$, $\tilde{u} \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{U}{N\tilde{N}}$, $\tilde{T} \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{T}{\tilde{N}}$ e $\tilde{p} \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{p}{\tilde{N}}$. A classificação usual da termodinâmica, que divide as variáveis em duas categorias, as extensivas e as intensivas, fica revista: passa a haver três categorias:

- (i) As variáveis energéticas (ex., energia de Gibbs, energia interna) perdem a extensividade e passam a escalar com $N\tilde{N}$;
- (ii) As variáveis não energéticas (S , V), preservam sua extensividade, i.e., escalam com N ;
- (iii) Os parâmetros de controle (T , p), variáveis canonicamente conjugadas da categoria anterior (dentro da estrutura da transformada de Legendre), perdem sua intensividade, passando a escalar com \tilde{N} .

Notemos que a relação reescalada (7.13) contém a relação de Euler, Eq. (7.11), como caso particular, no limite $\alpha/d \rightarrow \infty$ e $N \rightarrow \infty$ (quando $\tilde{N} \rightarrow 1$). Neste caso, a classificação usual que divide as variáveis termodinâmicas entre intensivas e extensivas é recuperada exatamente.

É possível transformar formalmente um sistema não-extensivo (com interações de longo alcance) em extensivo, reescrevendo seu Hamiltoniano como

$$\mathcal{H}' = K + \frac{V}{\tilde{N}}. \tag{7.14}$$

Este procedimento é usual na abordagem de campo médio ($\alpha = 0$), quando a constante de acoplamento fica dividida por N . É um procedimento artificial, pois se introduz um parâmetro macroscópico \tilde{N} (que depende de N) na interação microscópica. Esta forma de escrever o Hamiltoniano (Eq. (7.14)), juntamente com a Eq. (7.13), permitem perceber a conveniência da definição da variável \tilde{N} (Eq. (7.8)) sobre a variável N^* (Eq. (7.7)): com \tilde{N} , é possível ter os casos não interagente ($\alpha \rightarrow \infty$) e interações de alcance infinito ($\alpha = 0$) como casos particulares.

Tendo introduzido o fator de escala de tamanho finito \tilde{N} , vamos ao ponto central da conjectura de Tsallis, ilustrada na Figura 7.2, que diz respeito à não comutatividade dos limites $t \rightarrow \infty$ e $N \rightarrow \infty$. Consideremos um sistema com N partículas inicialmente num

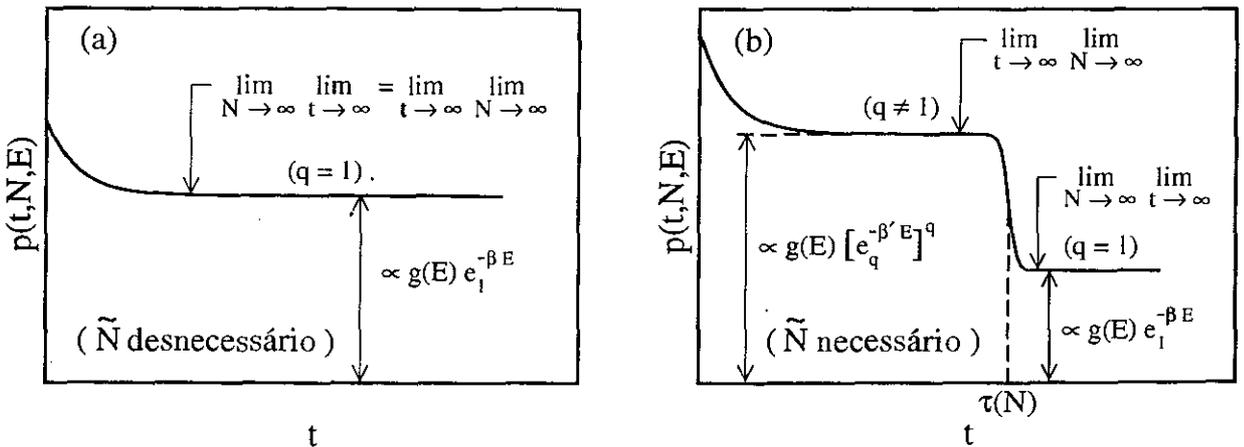


Figura 7.2: Conjectura sobre a não-comutatividade dos limites temporal e termodinâmico. (a) Sistema extensivo, com interações de curto alcance, levando ao caso usual de Boltzmann-Gibbs; (b) Sistema não-extensivo, com interações de longo alcance, definindo dois possíveis estados de equilíbrio, o primeiro patamar sendo uma violação forte de BG, e o segundo patamar, uma violação fraca.

estado de não-equilíbrio. No caso extensivo ($\alpha/d > 1$), após um transiente, o sistema

atinge seu estado de equilíbrio (Fig. 7.2(a)). Os limites temporal e termodinâmico comutam (Eq. (7.1)). Para sistemas não-extensivos ($0 \leq \alpha/d \leq 1$), dependendo da condição inicial, o sistema pode tender a um estado estacionário, representado pelo primeiro patamar da Fig. 7.2(b), cuja distribuição de energias não é dada pelo fator de Boltzmann, mas sim pela q -exponencial (de acordo com as probabilidades associadas (*escort probabilities*),

$$\begin{aligned} p(E) &\propto g(E) [1 - (1 - q)\beta' E]^{1-q} \\ &\propto g(E) [e_q(-\beta' E)]^q. \end{aligned} \quad (7.15)$$

Após permanecer um tempo neste estado (da ordem de $\tau(N)$), o sistema espontaneamente inicia uma transição para outro estado (o segundo patamar da Figura), cuja distribuição de energias é dada pelo fator de Boltzmann ($q = 1$). O tempo de transição deve divergir com N (para $0 \leq \alpha/d \leq 1$),

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \tau(N) \rightarrow \infty. \quad (7.16)$$

Com isto, se o limite termodinâmico for tomado antes do limite temporal, ($\lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty}$), (condição necessária, mas não suficiente) o sistema permanece indefinidamente no primeiro patamar, o que permite classificá-lo como um estado de equilíbrio (muitas vezes denominado equilíbrio meta-estável). Para alcançar o equilíbrio de Boltzmann-Gibbs, é suficiente (embora não seja necessário, vide Fig. 7.22) que os limites sejam tomados na ordem $\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty}$. O estado caracterizado pelo segundo patamar representa uma *violação fraca* de BG, pois a distribuição de energias é a usual, mas é necessária a utilização do fator de escala \tilde{N} . Já o primeiro patamar é uma *violação forte* de BG, pois nem mesmo a distribuição de energias é a exponencial.

7.2 Rotores clássicos anisotrópicos acoplados

7.2.1 Modelo

O modelo consiste em um conjunto de N rotores clássicos, cada um deles localizados em um sítio de um retículo unidimensional, com condições de contorno periódicas. Isto

equivale a uma topologia em forma de anel. No caso isotrópico, o Hamiltoniano é dado por

$$\mathcal{H}' = K + V_{xy}^{(\alpha)}, \quad (7.17)$$

onde K é a energia cinética,

$$K = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N p_i^2 \quad (7.18)$$

e o potencial é dado por

$$V_{xy}^{(\alpha)} = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \frac{1 - \cos(\theta_i - \theta_j)}{r_{ij}^\alpha} \quad (\alpha \geq 0), \quad (7.19)$$

sendo m a massa de uma partícula (assumimos $m = 1$), $\{\theta_i, p_i\}$ o ângulo e o momento angular (numericamente coincidente com a velocidade angular, com $m = 1$) da partícula i , que formam um par canonicamente conjugado. r_{ij} é a distância relativa entre a partícula i e a partícula j ($r_{ij} \equiv |r_i - r_j|$); as posições r_i são medidas em unidades do espaçamento do retículo ($r_{ij} = 1, 2, \dots$). Ao longo de um anel, é possível definir duas distâncias entre os sítios i e j . O modelo considera a menor delas (condições de contorno periódicas). Este modelo tem sido estudado na literatura, tanto o caso particular de interações de alcance infinito ($\alpha = 0$, inicialmente em [169]), quanto o caso geral ($\forall \alpha$, [170]). Muitas vezes o caso de alcance infinito é denominado *X-Y Hamiltonian Mean Field Model*, HMF. Genericamente, pode ser denominado modelo XY inercial de interações de longo alcance. Por ser simples e paradigmático, diversos têm sido os trabalhos baseados nele ([171, 172, 173, 174, 175, 176]). Recentemente foi feita uma extensão para três dimensões (modelo de Heisenberg clássico) [177].

É possível quebrar a simetria por rotação adicionando ao Hamiltoniano (7.17), termos anisotrópicos (e é esta exatamente nossa contribuição, vide Ref. [178]). Por exemplo,

$$V_\epsilon^{(\alpha)} = \frac{\epsilon}{2N} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \frac{1 - \cos(\theta_i + \theta_j)}{r_{ij}^\alpha} \quad (0 \leq \epsilon \leq 1) \quad (7.20)$$

é um termo de acoplamento entre os sítios i e j que favorece os ângulos 0 e π em relação aos demais. Outra possibilidade é a utilização do potencial

$$V_L = L \sum_{i=1}^N \text{sen}^2 \theta_i. \quad (7.21)$$

Este é um termo local (daí o índice L) que também favorece os ângulos 0 e π . Quando $L \rightarrow \infty$, o modelo se transforma numa versão clássica do modelo de Ising de alcance variável, com espectro discreto de posições admissíveis. ($\theta_i = 0$ ou $\theta_i = \pi$). A versão clássica do modelo de Ising (interações entre primeiros vizinhos) seria obtida com $L \rightarrow \infty$ e $\alpha \rightarrow \infty$. Usamos o qualificativo *versão clássica* pois o presente modelo apresenta o termo cinético, que não aparece na versão quântica. O Hamiltoniano completo fica

$$\mathcal{H}' = K + V_{xy}^{(\alpha)} + V_\epsilon^{(\alpha)} + V_L, \quad (7.22)$$

de onde decorre a seguinte equação de movimento ($\ddot{\theta}_i = -\partial \mathcal{H}' / \partial \theta_i$)

$$\ddot{\theta}_i = \frac{1}{\tilde{N}} \sum_{j \neq i}^N \frac{\text{sen}(\theta_j - \theta_i) - \epsilon \text{sen}(\theta_j + \theta_i)}{r_{ij}^\alpha} - 2L \text{sen} \theta_i \cos \theta_i. \quad (7.23)$$

Quando as interações são de curto alcance, é possível definir uma distância de corte r_c tal que sítios que estejam separados por $r_{ij} \geq r_c$ tenham interações suficientemente pequenas para que possam ser desprezadas. Isto introduz uma grande simplificação operacional no modelo: com o corte, não é necessário avaliar os N^2 termos dos somatórios duplos, mas apenas um número significativamente menor e o problema se torna mais viável de ser tratado computacionalmente. Particularmente, para $\alpha \rightarrow \infty$, as interações se reduzem aos primeiros vizinhos ($r_c = 1$). Os termos $V_{xy}^{(\alpha)}$ e $V_\epsilon^{(\alpha)}$ do potencial ficam

$$V_{xy}^{(\infty)} + V_\epsilon^{(\infty)} = (1 + \epsilon)N - \sum_{i=1}^N [\cos(\theta_i - \theta_{i+1}) - \epsilon \cos(\theta_i + \theta_{i+1})], \quad (7.24)$$

e a equação de movimento,

$$\begin{aligned} \ddot{\theta}_i = & - \text{sen}(\theta_i - \theta_{i+1}) - \text{sen}(\theta_i - \theta_{i-1}) - \epsilon \text{sen}(\theta_i + \theta_{i+1}) - \epsilon \text{sen}(\theta_i + \theta_{i-1}) \\ & - 2L \text{sen} \theta_i \cos \theta_i. \end{aligned} \quad (7.25)$$

Interações de longo alcance nunca são desprezíveis, mesmo para $r \rightarrow \infty$, e assim não é possível definir uma distância de corte. O número de operações computacionais cresce com N^2 e isso limita bastante a possibilidade de se avaliar tais sistemas com muitas partículas. Entretanto, quando o alcance das interações é levado ao extremo, i.e., alcance infinito ($\alpha = 0$), as interações se tornam independentes da distância. O problema se torna de ordem N . Vejamos como: usando a relação trigonométrica

$$\cos(\theta_i \pm \theta_j) = \cos \theta_i \cos \theta_j \mp \text{sen} \theta_i \text{sen} \theta_j, \quad (7.26)$$

observando que os somatórios duplos podem ser escritos como

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N (\cdot) &= \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\cdot) (1 - \delta_{ij}) \\ &= \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\cdot) - \sum_{i=1}^N (\cdot), \end{aligned} \quad (7.27)$$

sendo δ_{ij} o delta de Kronecker, e ainda tendo em conta que $\tilde{N} = N$ para $\alpha = 0$ (Eq. (7.9)), o Hamiltoniano de alcance infinito fica

$$\mathcal{H}' = K + V_{xy}^{(0)} + V_{\epsilon}^{(0)} + V_L, \quad (7.28)$$

com

$$V_{xy}^{(0)} + V_{\epsilon}^{(0)} = \frac{1+\epsilon}{2}(N-1) - \frac{1+\epsilon}{2}NM_x^2 - \frac{1-\epsilon}{2}NM_y^2 + \frac{1+\epsilon}{2}M_{xx} + \frac{1-\epsilon}{2}M_{yy} \quad (7.29)$$

e

$$M_x \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \cos \theta_i, \quad M_y \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \text{sen} \theta_i, \quad (7.30)$$

$$M_{xx} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \cos^2 \theta_i, \quad M_{yy} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \text{sen}^2 \theta_i. \quad (7.31)$$

M_x e M_y são as componentes x e y do vetor magnetização. A equação de movimento fica

$$\ddot{\theta}_i = (1 - \epsilon)M_y \cos \theta_i - (1 + \epsilon)M_x \text{sen} \theta_i + 2 \left(\frac{\epsilon}{N} - L \right) \cos \theta_i \text{sen} \theta_i. \quad (7.32)$$

Nosso trabalho se limitou ao caso de interações de alcance infinito ($\alpha = 0$), embora tenhamos feito rápidas análises no bem conhecido caso de interações apenas entre primeiros vizinhos ($\alpha \rightarrow \infty$), para evidenciar mais claramente a conjectura através de comparações.

7.2.2 Procedimento computacional

Nosso objetivo é avaliar algumas propriedades dos sistemas definidos na Sub-seção anterior, utilizando a técnica da dinâmica molecular. Trabalhamos com o ensemble microcanônico, no qual fixamos² o número de partículas N , a energia total por partícula E/N , as condições iniciais de ângulos e velocidades angulares e, naturalmente, os parâmetros α , L , ϵ . O sistema, então, é deixado evoluir de acordo com sua dinâmica. Ao longo de sua evolução temporal, registramos, em instantes de tempo uniformemente espaçados em escala logarítmica (embora o programa que desenvolvemos também permita amostragem em intervalos linearmente espaçados) as variáveis

- (i) $2K/dN$, que, na estrutura da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs, corresponde à temperatura;
- (ii) O valor absoluto da magnetização, $|M| = \sqrt{M_x^2 + M_y^2}$, juntamente com os componentes M_x e M_y ;
- (iii) A energia total por partícula E/N .

São realizadas diferentes amostragens, variando condições iniciais e mantendo os demais parâmetros constantes. Então são feitas médias das variáveis amostradas sobre diferentes realizações. Usamos os símbolos $2\langle K \rangle/dN$, $\langle M \rangle/N$ para representar estas médias.

A rotina de computador implementada permite as seguintes especificações para as condições iniciais de ângulos:

- (i) Todos os ângulos iguais a 0 ou todos iguais a π . Este estado corresponde ao de mínima energia potencial. No instante inicial, toda energia do sistema está sob a forma de energia cinética;
- (ii) Ângulos aleatórios entre 0 e π .
- (iii) Ângulos 0 e π , alternadamente, correspondendo a um sistema anti-ferro-magnético;

²O modelo reticular automaticamente mantém constante a densidade de partículas, uma vez que a distância entre os sítios é fixa.

(iv) Ângulos especificados pelo usuário, lidos em arquivo.

É necessário cuidado quando utilizamos qualquer condição inicial para os ângulos diferentes do item (i): se a energia total especificada for pequena, uma vez gerados os ângulos, pode ocorrer que a energia potencial (que depende apenas de $\{\theta_i\}$) seja maior que aquela energia total que se deseja especificar. Neste caso, obviamente, a configuração tentada para $\{\theta_i\}$ não é aceitável. O programa diminui os ângulos até que a energia potencial se torne menor que a total.

As condições iniciais de velocidades angulares implementadas são

- (i) Distribuição uniforme de suporte compacto entre $(-p_c, p_c)$ ($p_c > 0$), algumas vezes denominada *water bag distribution*;
- (ii) Distribuição uniforme de suporte compacto entre $(-p_{c2}, -p_{c1})$ e (p_{c1}, p_{c2}) ($p_{c2} > p_{c1} > 0$), também denominada *double water bag distribution*;
- (iii) Velocidades especificadas pelo usuário, lidas em arquivo.

A Figura 7.3 ilustra as distribuições *water bag* e *double water bag*. Os valores p_c ou p_{c1} , p_{c2} , são calculados de modo a ajustar a energia total por partícula E/N especificada. Tomamos o cuidado de anular o momento angular total. A grande maioria dos casos que analisamos se encaixam nas categorias: todos os ângulos iguais a 0; distribuição *water bag* de velocidades. As demais possibilidades de condições iniciais foram testadas em um pequeno número de eventos, quando constatamos não serem essenciais para o objetivo do nosso trabalho.

O programa também permite avaliar distribuições de velocidades. Para termos um bom histograma, são necessários muitos dados (gerados por muitas realizações de um mesmo estado macroscópico). Infelizmente os recursos computacionais e as limitações de tempo não permitem avaliar adequadamente qual a distribuição de velocidades em cada instante de tempo, especialmente para o segundo patamar. Para superar este problema, utilizamos um procedimento que esperamos não altere significativamente os resultados: são

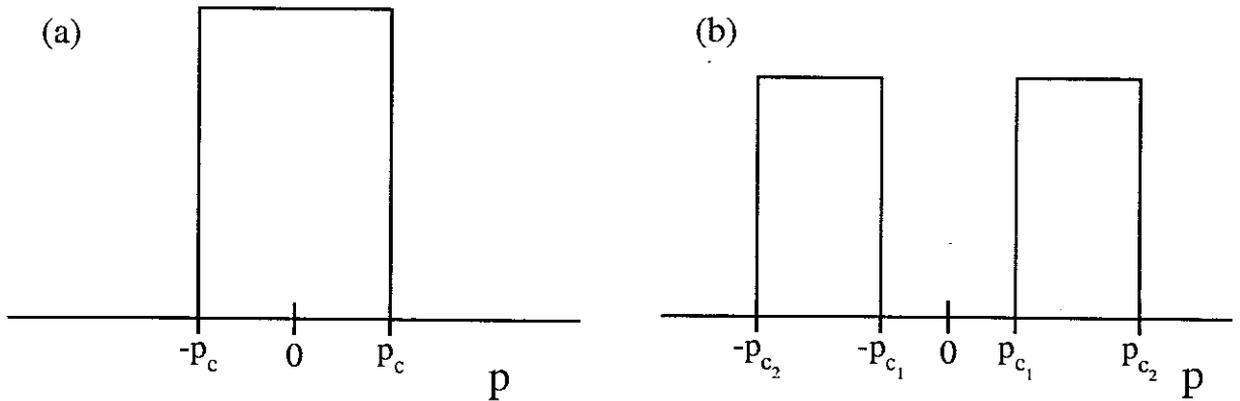


Figura 7.3: Distribuições iniciais de velocidades; (a) *water bag*; (b) *double water bag*.

computadas as velocidades de todas as partículas em vários instantes de tempo (observando que estes instantes de tempo pertençam ao mesmo patamar, seja o não-extensivo ou o extensivo). Os instantes de tempo nos quais tomamos as velocidades são relativamente afastados entre si, de modo a minimizar possíveis efeitos de correlação temporal. Diferentes realizações, com velocidades amostradas nos mesmos instantes de tempo, colaboram para melhorar os histogramas. A Figura 7.4 ilustra o procedimento. Para avaliar distribuições de velocidades no primeiro patamar, muitas vezes não utilizamos este recurso, e sim fizemos várias realizações, registrando as velocidades em um único dado instante de tempo.

A integração das equações de movimento foi implementada usando o algoritmo simplético de quarta ordem de Yoshida [179], que dá uma boa precisão na conservação da energia total para sistemas Hamiltonianos. Utilizamos passo de integração $\Delta t = 0.1$, que gera erros relativos na conservação de energia (para este sistema) em torno de $|\Delta E/E| \sim 10^{-6}$. A Figura 7.5 ilustra como o passo de integração altera o erro relativo na conservação de energia, sugerindo uma lei de potência. Os efeitos dos parâmetros E/N , N , L e ϵ sobre os erros na conservação da energia são ilustrados na Figura 7.6 ($\alpha = 0$ e $\Delta t = 0.1$ em todos os casos ilustrados).

Antes de fechar esta Sub-seção, mencionamos sobre outras abordagens mais sofisticadas que têm sido recentemente utilizadas na literatura [47], levando a resultados promissores: condições iniciais ligeiramente diferentes da *water bag* ou *double water bag*, repre-

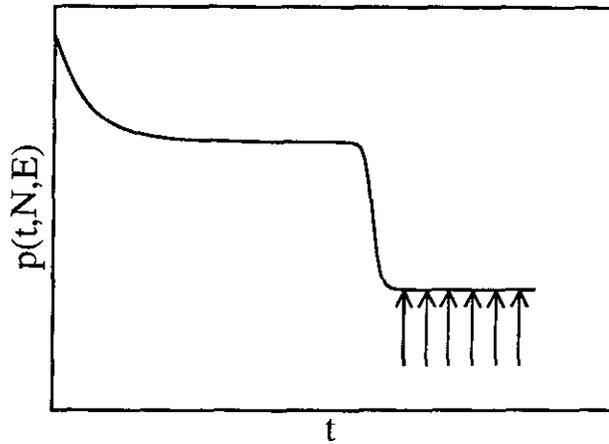


Figura 7.4: Procedimento para avaliação da distribuição de velocidades. As setas indicam tempos em que as velocidades de todas as partículas são computadas para o histograma. Os tempos de amostragem não incluem o período transiente nem a transição entre regimes.

sentação de um ensemble canônico através da simulação de um sistema + reservatório de calor, e a adoção de um termômetro com interações internas de curto alcance, em contato com o sistema de rotores, este com interações internas de longo alcance (interações entre o sistema e o termômetro de curto alcance), permitindo inclusive a verificação da lei zero da termodinâmica.

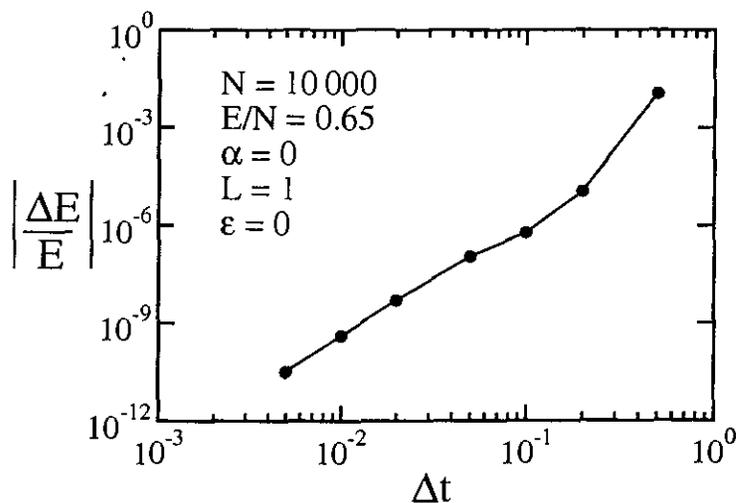


Figura 7.5: Efeito do passo de integração na conservação da energia.

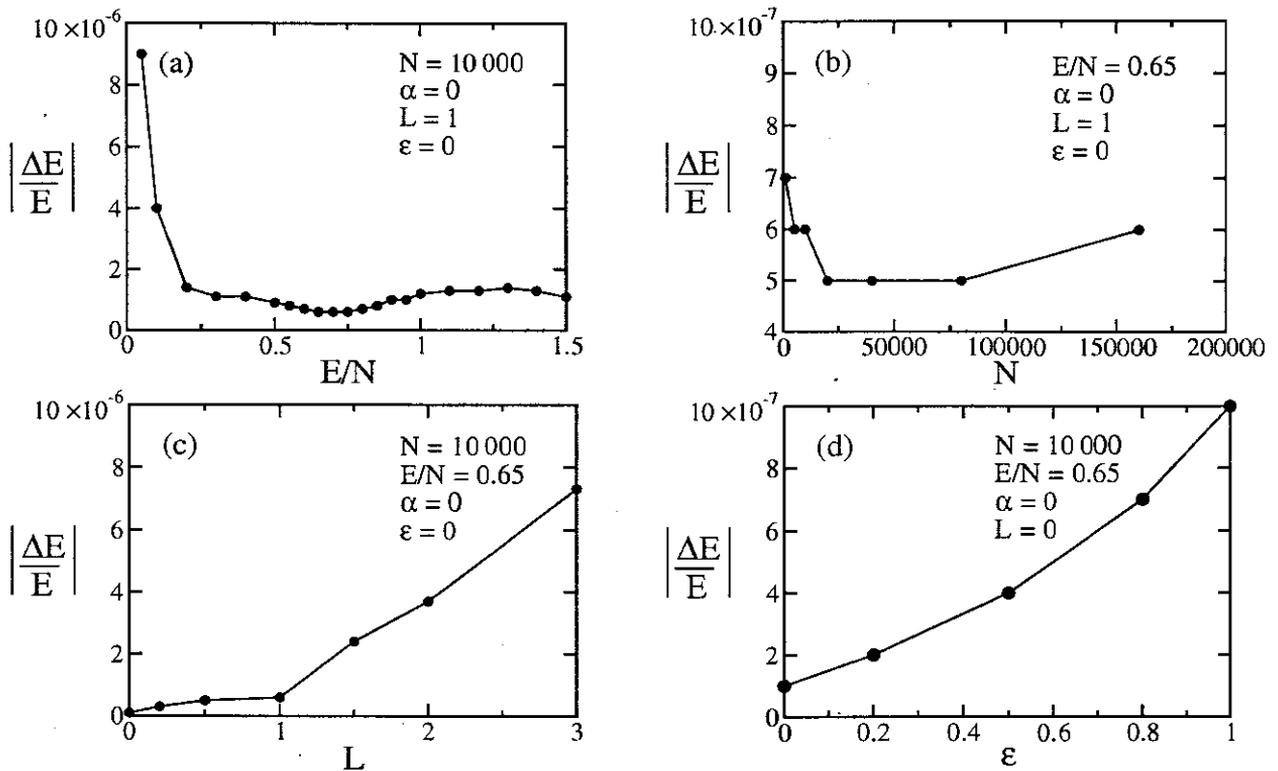


Figura 7.6: Erros relativos médios na conservação da energia. Passo de integração $\Delta t = 0.1$. (a) Efeito da energia por partícula E/N ; (b) Efeito do número de partículas N ; (c) Efeito do parâmetro de anisotropia local L ; (d) Efeito do parâmetro de anisotropia não-local ϵ . As linhas são apenas guias para os olhos.

7.2.3 Resultados

Iniciemos tratando um sistema de curto alcance ($\alpha \rightarrow \infty$), descrito pelas Equações (7.24) e (7.25), caso completamente incluído no cenário de Boltzmann-Gibbs. A Figura 7.7 ilustra o comportamento padrão, para $L = 0$ e $\epsilon = 0$, com $N = 1\,000$. Verificamos que, após um transiente, a temperatura se estabiliza em um patamar estável, o sistema não apresenta mudança de fases e a distribuição de velocidades é a de Maxwell-Boltzmann.

Analisamos, então, um modelo anisotrópico com interações entre primeiros vizinhos ($\alpha \rightarrow \infty$, $L = 1$, $\epsilon = 0$). A Figura 7.8 mostra a evolução temporal da temperatura. Existe um prenúncio de formação de um patamar meta-estável, anterior ao patamar de Boltzmann-Gibbs. Ocorre que este proto-patamar (poderíamos denominá-lo assim) não cresce com o aumento do sistema. Em outras palavras, o tempo de transição entre o primeiro e segundo patamar, τ (ilustrado na Fig. 7.2), não é função de N , con-

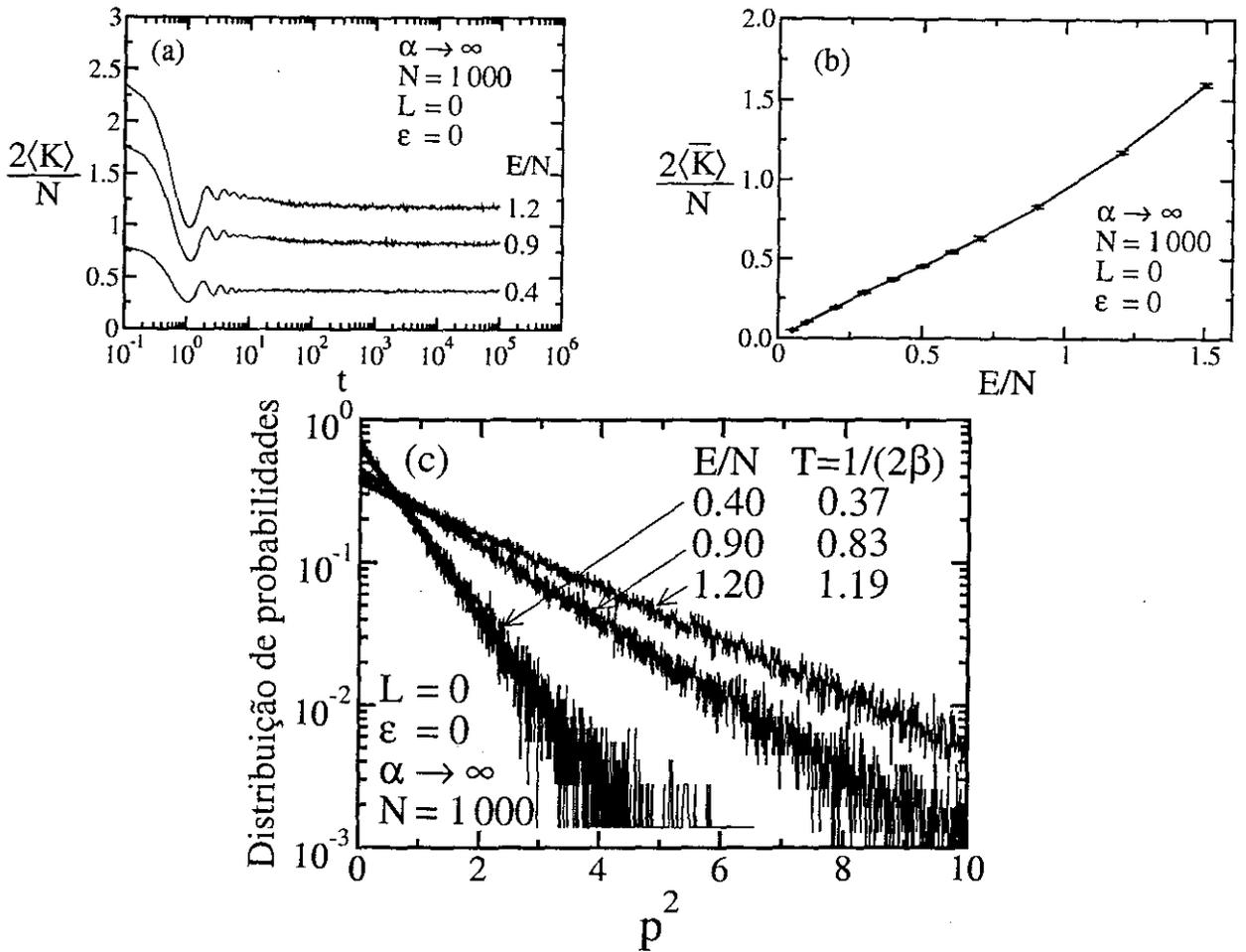


Figura 7.7: Rotores isotrópicos com interações entre primeiros vizinhos. $\alpha \rightarrow \infty$, $N = 1000$, $L = 0$, $\epsilon = 0$. Velocidades iniciais com distribuição *water bag*. (a) Evolução temporal da temperatura; (b) Curva calórica, avaliada por média temporal de curvas do tipo da Fig. (a), ao longo do patamar; (c) Distribuição de probabilidades de velocidades, em escala x -linear, y -logarítmica, abscissa com p^2 (Gaussianas aparecem como retas). A temperatura, dada por $\beta = |\text{Inclinação}| = 1/(2T)$, é compatível com valores da Fig. (b). As curvas representam médias sobre diferentes realizações: 10($E/N = 0.05, 0.10$), 8($E/N = 0.20$), 7(0.30), 4(0.40), 9(0.50), 7(0.60), 5(0.90), 7(1.20), 7(1.50).

seqüentemente, existe apenas um regime estável, como deve ser, dentro do formalismo de Boltzmann-Gibbs. A curva calórica para sistemas com interações apenas entre primeiros vizinhos é apresentada na Figura 7.9, mostrando os casos isotrópico ($L = 0$, $\epsilon = 0$, esta também mostrada na Fig. 7.7b), anisotrópico com termo local ($L = 1$, $\epsilon = 0$) e

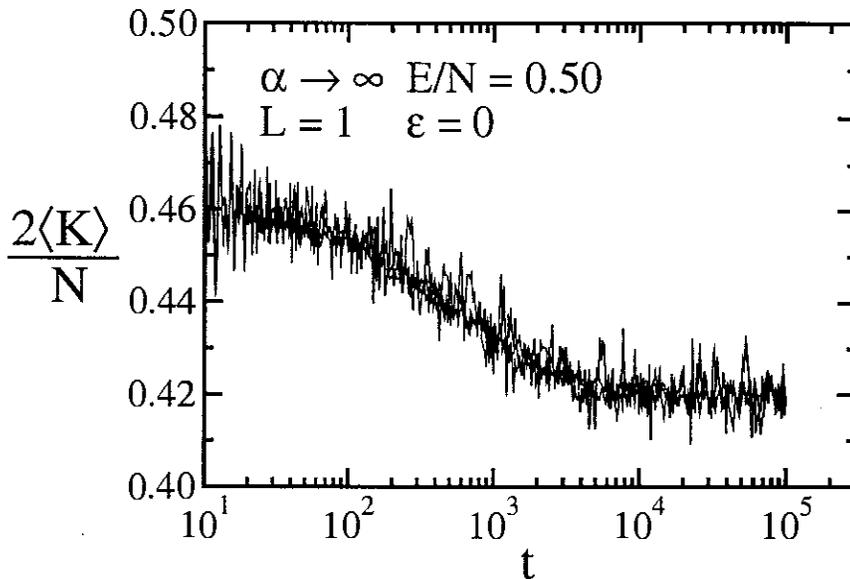


Figura 7.8: Evolução temporal da temperatura para rotores anisotrópicos com interações apenas entre primeiros vizinhos. $\alpha \rightarrow \infty$, $E/N = 0.50$, $L = 1$, $\epsilon = 0$. Número de partículas $N = 1\,000$, $5\,000$, $10\,000$. As curvas são superpostas, e são indistinguíveis neste gráfico monocromático. Foram feitas 10 realizações em cada caso.

anisotrópico com termo de interações ($L = 0$, $\epsilon = 1$).

Já havia sido detectado o regime não-extensivo (às vezes denominado regime meta-estável, ou ainda estado quase-estacionário) no modelo isotrópico de alcance infinito ($\alpha = L = \epsilon = 0$) [174], na energia por partícula $E/N = 0.69$. Nós reproduzimos este sistema nesta condição específica, e também constatamos dois regimes, caracterizados por patamares distintos na evolução temporal da energia cinética média por partícula (no caso de longo alcance, evitamos denominar esta média por *temperatura*). A Figura 7.10 apresenta nossos resultados com $N = 1\,000$ e $N = 10\,000$. A energia cinética média por partícula do regime não-extensivo coincide com os valores encontrados anteriormente [174]: ~ 0.426 , para $N = 1\,000$ e ~ 0.4 para $N = 10\,000$; no regime extensivo, a energia cinética média ~ 0.47 . Mais uma concordância dos resultados que encontramos com os previamente reportados é a ordem dos tempos de transição, $\tau(N = 1\,000) \sim 20\,000$ e $\tau(N = 10\,000) \sim 60\,000$. Verificamos que este estado meta-estável é robusto face a pequenas perturbações: o procedimento que adotamos de tomar médias sobre várias realizações

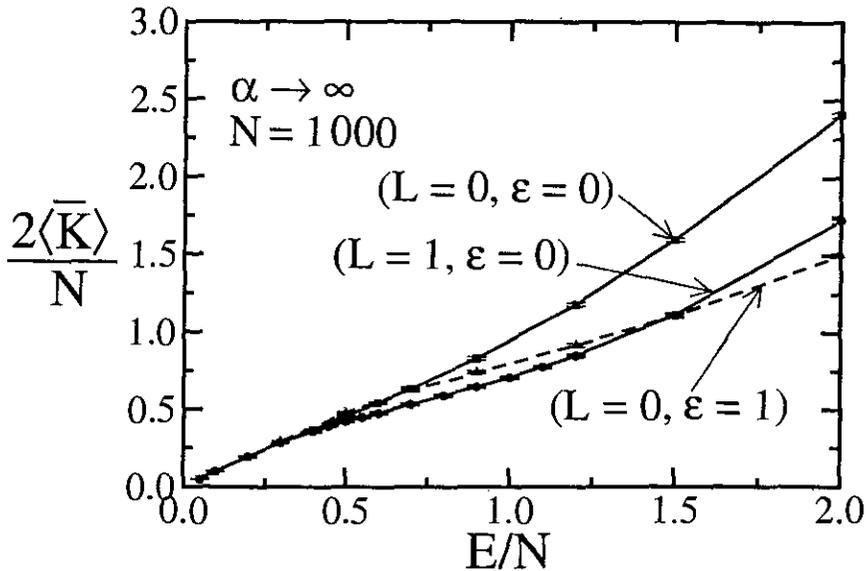


Figura 7.9: Curva calórica de sistemas com interações entre primeiros vizinhos ($\alpha \rightarrow \infty$, $N = 1000$). Caso isotrópico ($L = 0$, $\epsilon = 0$), com termo de anisotropia local ($L = 1$, $\epsilon = 0$) e com termo de anisotropia de interação ($L = 0$, $\epsilon = 1$, linha pontilhada). Cerca de 10 realizações para cada ponto da curva.

corresponde introdução de perturbações, e o sistema permanece com sua energia cinética média por partícula no mesmo patamar.

A Figura 7.11 mostra a distribuição de probabilidades de velocidades para este sistema ($N = 10\,000$). As Figuras (a) e (b) se referem ao caso não-extensivo, e as Figuras (c) e (d), o caso extensivo.

No modelo anisotrópico, também identificamos a existência de um estado meta-estável. A Figura 7.12 apresenta os resultados para $L = 1$, $\epsilon = 0$ e $E/N = 0.65$ (este, como os demais casos estudados, são para interações de alcance infinito, $\alpha = 0$).

Percebemos que a medida que N cresce, o patamar inicial (que neste caso é superior ao de Boltzmann-Gibbs) se torna mais bem definido e duradouro. A Figura 7.12 tem o tempo em escala logarítmica, portanto notemos que a transição é um processo lento. Podemos definir um tempo característico desta transição, τ_m , estimado como o tempo para o qual $2\langle K \rangle / N$ assume o valor médio entre o primeiro e o segundo patamares. Outra possível caracterização é o tempo de chegada ao segundo patamar, τ_B , que é mais

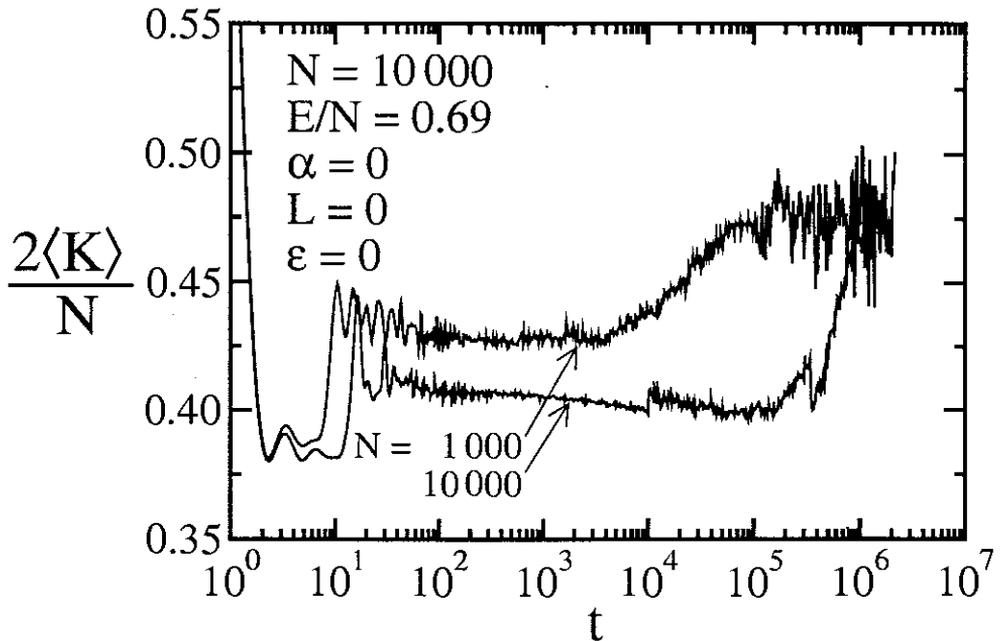


Figura 7.10: Evolução temporal da energia cinética média por partícula para modelo isotrópico de alcance infinito. As curvas representam média sobre vários eventos. O número de eventos para pequenos tempos é maior que o número para grandes tempos, por esta razão as flutuações são maiores para tempos maiores: para $N = 1000$, foram feitas 57 realizações até o tempo 10^5 , e 2 realizações até 10^6 . Para $N = 10000$, temos 27 realizações até $t = 10^4$, e 4 até $t = 10^6$.

bem definido do que o tempo de saída do primeiro patamar. A Figura 7.13 mostra que τ (seja τ_m ou τ_B) cresce com o tamanho do sistema de acordo com uma lei de potência. A conclusão que segue por indução é que se o limite $\lim_{N \rightarrow \infty}$ for tomado antes de $\lim_{t \rightarrow \infty}$, este primeiro patamar passa a ter duração infinita — o sistema permanece indefinidamente neste estado, i.e., adquire invariância temporal, o que permite caracterizá-lo como *estado de equilíbrio*. Se os limites são tomados na ordem inversa, $\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty}$, o estado de Boltzmann-Gibbs é alcançado.

A Figura 7.14 ilustra a magnetização média $\langle M \rangle / N$ para este sistema, na mesma condição $E/N = 0.65$.

Existe uma faixa de energias para as quais existe um estado meta-estável. A Figura 7.15 compara a evolução temporal da energia cinética média por partícula para energias inferior e superior à usada na Fig. 7.12. Em energias mais baixas, o sistema exibe apenas um

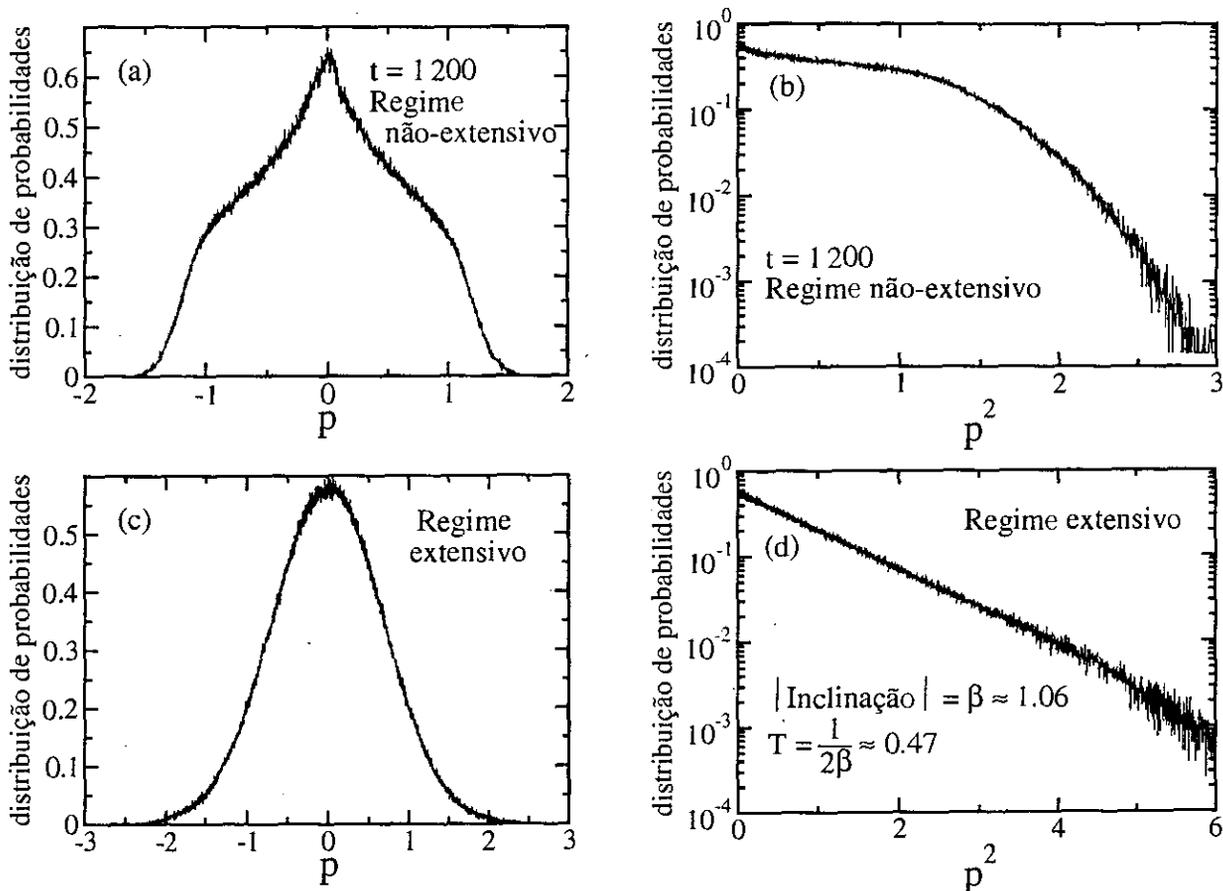


Figura 7.11: Distribuição de probabilidades de velocidades para o modelo isotrópico. $N = 10\,000$, $E/N = 0.69$, $\alpha = 0$, $L = 0$, $\epsilon = 0$. (a) e (b): Regime não-extensivo, amostragem em $t = 1\,200$, 300 realizações; (c) e (d): Regime extensivo, amostragem entre $t = 1.9 \times 10^6$ e $t = 2.2 \times 10^6$, a cada 1 000 unidades de tempo, em uma única realização, equivalente a 340 realizações. Figuras (a) e (c), escala linear, abscissa com p ; Figuras (b) e (d), escala x -linear, y -logarítmica, abscissa com p^2 .

estado (o de Boltzmann). O estado meta-estável tende a desaparecer em energias mais altas.

Tomamos médias temporais da energia cinética média por partícula nos regimes meta-estável e estável, e com isso construímos a curva calórica, mostrada na Figura 7.16(a). A variável $\langle \bar{K} \rangle$ representa média de realizações e média temporal. Similarmente procedemos para construir a curva de magnetização, Fig. 7.16(b). Este sistema apresenta região de energias com calor específico negativo. O caso $E/N = 0.65$, apresentado na Fig. 7.12, se situa nesta região anômala.

Avaliamos a distribuição de velocidades angulares para um sistema com $N = 10\,000$,

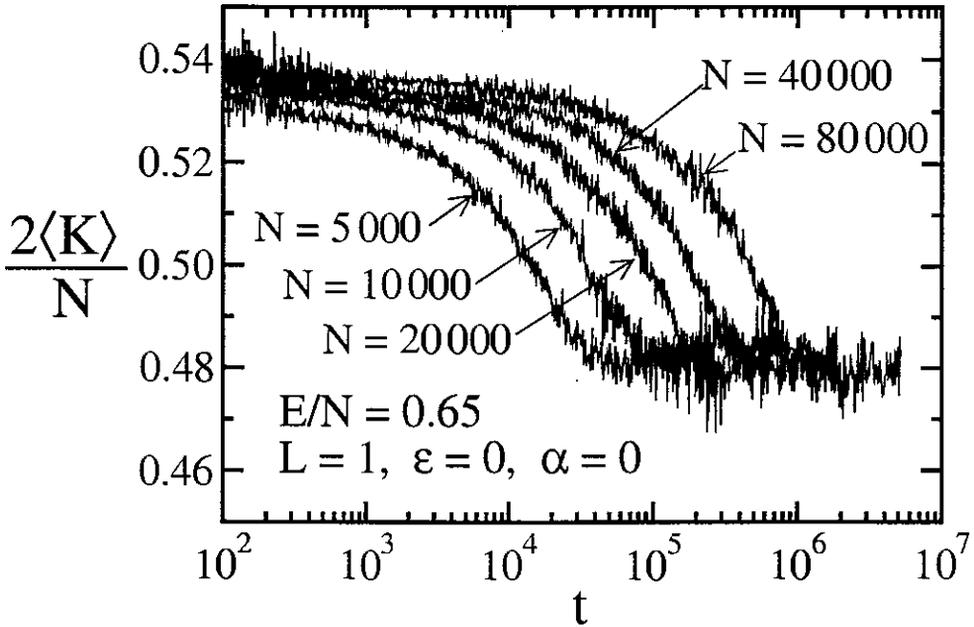


Figura 7.12: Evolução temporal da energia cinética média por partícula para $L = 1$, $\epsilon = 0$, $\alpha = 0$ e $E/N = 0.65$. As curvas são médias sobre várias realizações de configurações iniciais. Ângulos iniciais iguais a zero. Distribuição inicial de velocidades angulares do tipo *water bag*. Tempos iniciais de cada curva têm mais realizações que tempos avançados. Número total de realizações: 148 ($N = 5000$), 568 ($N = 10000$), 152 ($N = 20000$), 31 ($N = 40000$), 43 ($N = 80000$). Regime transiente não é mostrado.

$E/N = 0.65$, $L = 1$, $\epsilon = 0$, tanto no regime meta-estável quanto no regime Boltzmanniano. A Figura 7.17 apresenta os resultados, em 4 escalas distintas, para melhor visualização. Fica claro que o segundo patamar é um regime Boltzmanniano, com distribuição de velocidades Gaussiana. Fica claro também que o primeiro patamar não apresenta uma distribuição Gaussiana. A Figura (d) sugere um trecho em lei de potência. Fazendo a equivalência Inclinação = $1/(q - 1)$, encontramos $q \approx 6.9$. É um valor elevado, mas da mesma ordem do valor encontrado na Ref. [174], com o modelo isotrópico ($L = \epsilon = 0$). A Figura 7.18 apresenta distribuições de velocidade no regime meta-estável para este sistema, variando o número de partículas. Os resultados não são conclusivos (seriam necessários resultados com sistemas com mais partículas e melhores estatísticas), mas a Figura sugere que o trecho em lei de potência cresce com N .

Quando utilizamos $L = 5$, o primeiro patamar fica mais bem definido (i.e., mais

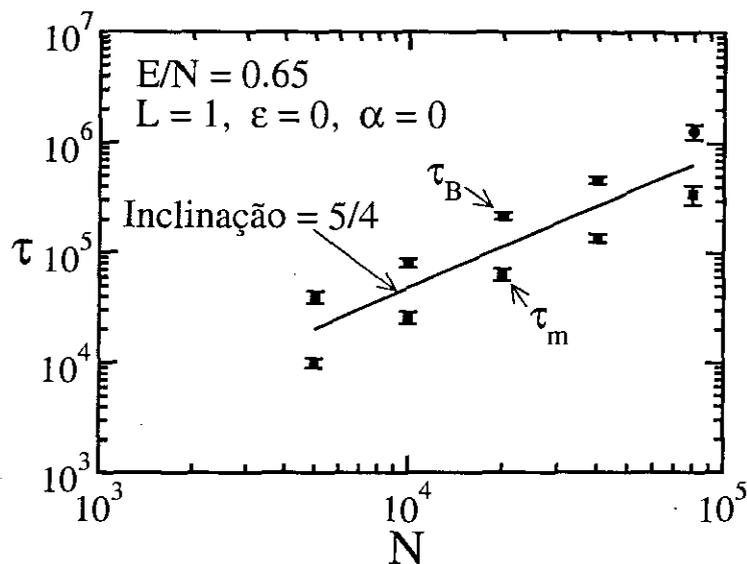


Figura 7.13: Tempos de transição entre regimes meta-estável e estável.

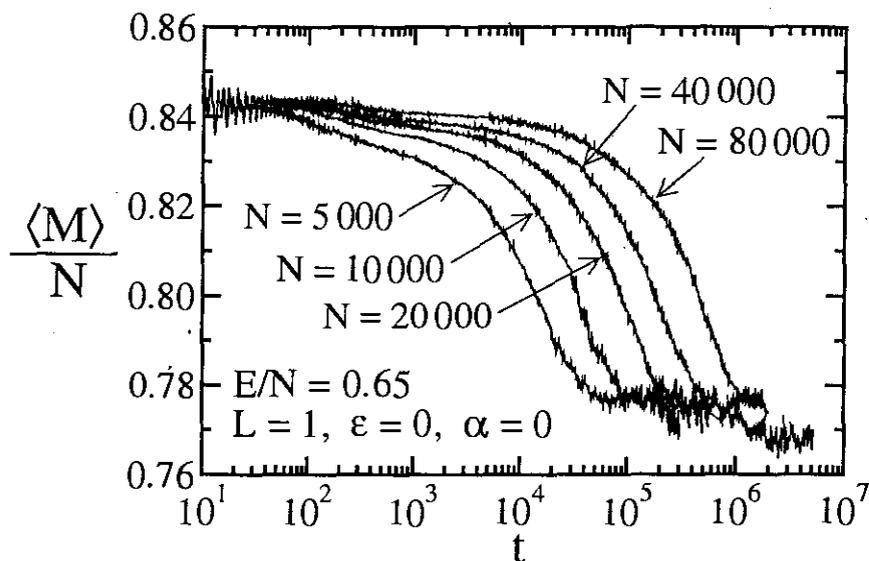


Figura 7.14: Evolução temporal da magnetização média $\langle M \rangle / N$. $L = 1, \epsilon = 0, \alpha = 0, E/N = 0.65$. Os números de realizações são os mesmos da Fig. 7.12. Regime transiente não é mostrado.

“horizontal” mesmo para valores menores de N) e também mais duradouro. Observemos a Figura 7.19, que apresenta resultados com 1000 e 2000 partículas, em apenas uma realização, e a comparemos com a Figura 7.12.

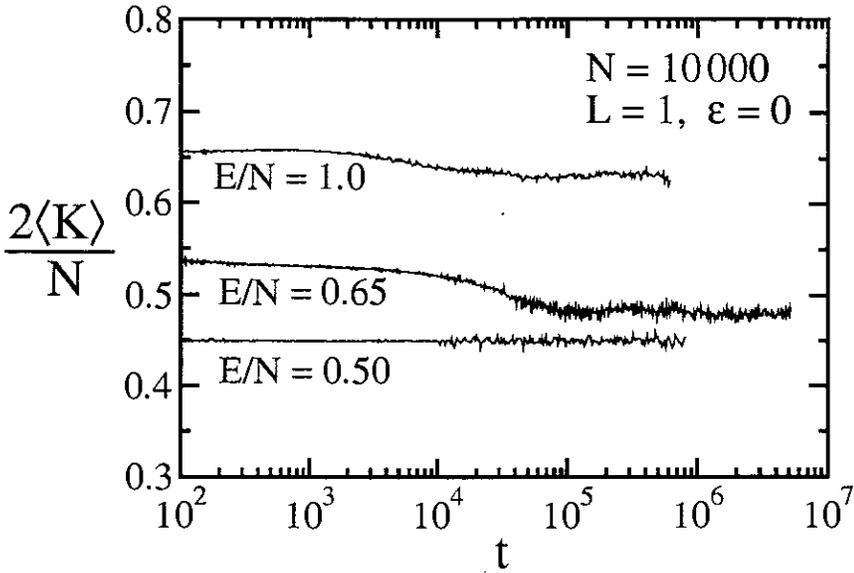


Figura 7.15: Evolução temporal da energia cinética média por partícula para $L = 1$, em diferentes energias. $N = 10000$, $L = 1$, $\epsilon = 0$, $\alpha = 0$. Número de realizações: 300 ($E/N = 0.50$), 568 ($E/N = 0.65$), 225 ($E/N = 1.0$).

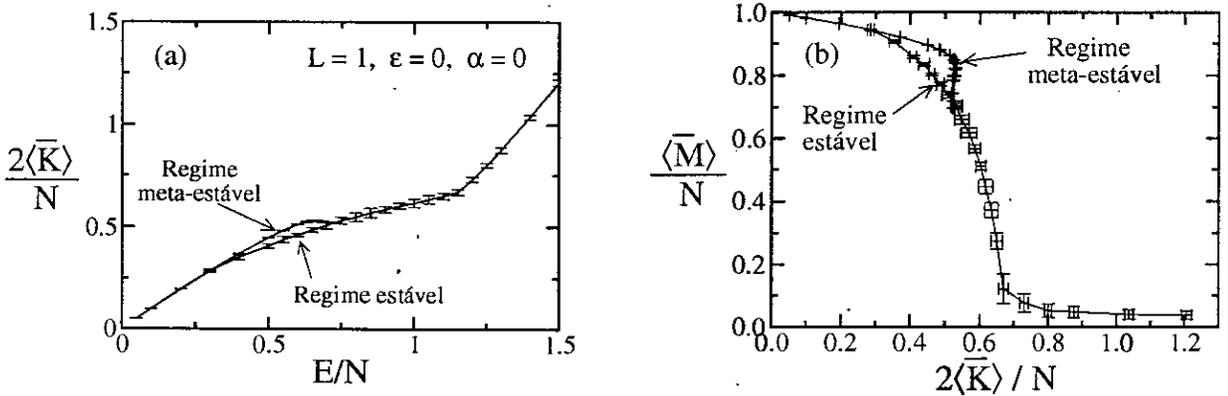


Figura 7.16: (a) Curva calórica para modelo anisotrópico com $L = 1$, $\epsilon = 0$, $\alpha = 0$; (b) Curva de magnetização. O regime meta-estável foi obtido com $N = 10000$, enquanto o regime estável (BG) foi obtido com $N = 1000$. Este sistema apresenta região com calor específico negativo.

A energia cinética média por partícula do regime meta-estável pode ser superior ou inferior à do regime Boltzmanniano. A Figura 7.20 ilustra essas duas possibilidades para um sistema com $L = 0.2$. Na energia por partícula $E/N = 0.60$, $T_{next} < T_B$, enquanto para $E/N = 0.83$, $T_{next} > T_B$. A Figura 7.21 apresenta os tempos de transição τ_m e τ_B

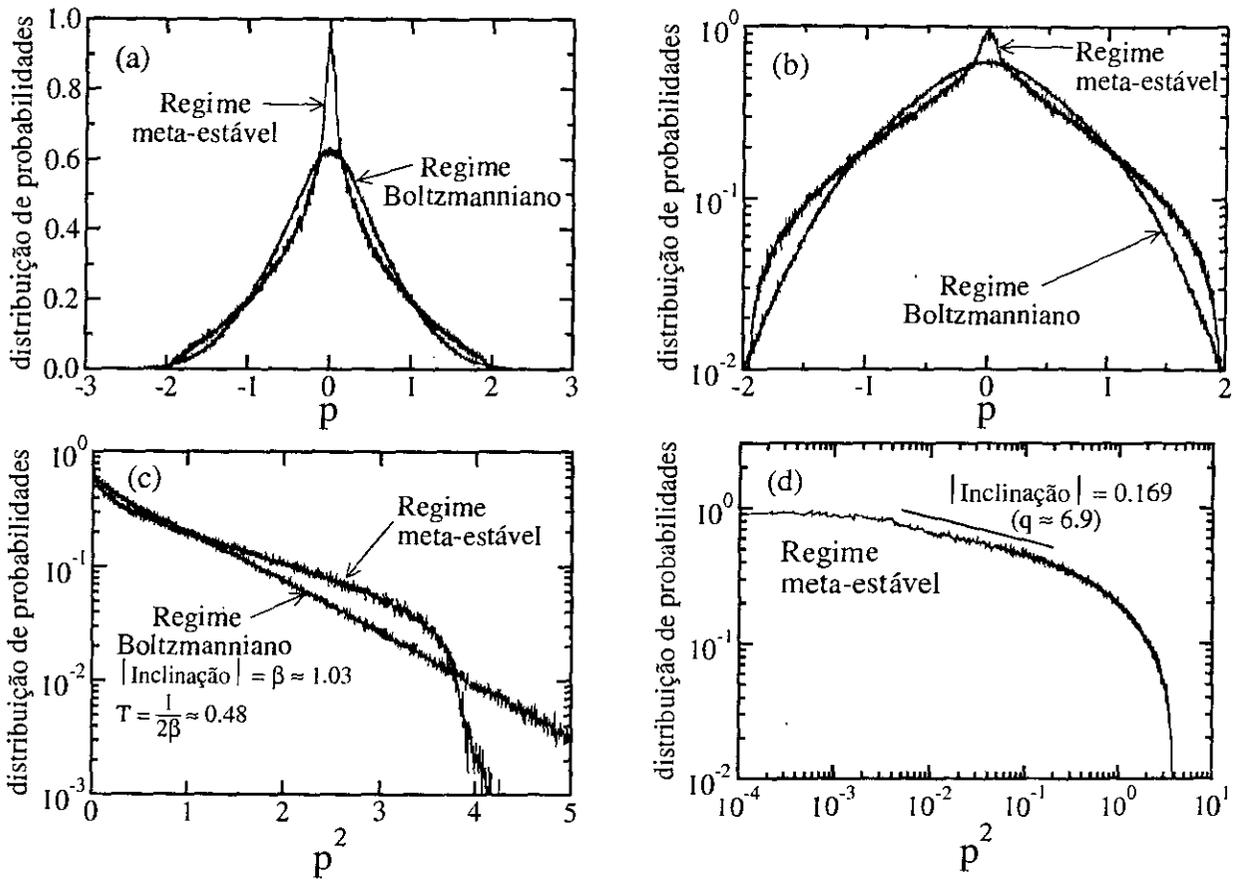


Figura 7.17: Distribuição de probabilidades de velocidades do modelo anisotrópico, com $N = 10\,000$, $E/N = 0.65$, $\alpha = 0$, $L = 1$, $\epsilon = 0$. Para o regime meta-estável, foram feitas 226 realizações no tempo $t = 1000$. Para o regime Boltzmanniano, amostragens entre $t = 3.28 \times 10^6$ e $t = 4.216 \times 10^6$, a cada 1000 unidades de tempo, em uma única realização, equivalente a 940 realizações. (a) Abscissa com p , escala x -linear, y -linear; (b) Abscissa com p , escala x -linear, y -logarítmica (Gaussianas aparecem como parábolas); (c) Abscissa com p^2 , escala x -linear, y -logarítmica (Gaussianas aparecem como retas decrescentes). A inclinação (em valor absoluto) corresponde a uma temperatura $T \approx 0.48$, compatível com o segundo patamar da Fig. 7.12; (d) Abscissa com p^2 , escala x -logarítmica, y -logarítmica (leis de potência aparecem como retas). Nesta última figura (d), é representado apenas o regime meta-estável. A curva sugere um trecho em lei de potência. A inclinação (negativa) acentuada para valores mais elevados de p^2 presumivelmente é consequência de baixa estatística.

para este exemplo, sendo também crescentes de acordo com uma lei de potência.

Finalmente ilustramos que, para alcançar o regime meta-estável, é necessário, mas não suficiente tomar os limites na ordem $\lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty}$. A Figura 7.22 apresenta duas realizações de um sistema com $N = 5000$, $\alpha = 0$, $E/N = 0.5$, $\epsilon = 0.5$ e $L = 0$. Ambas as realizações foram feitas com a distribuição inicial de velocidades *water bag*, e todos os

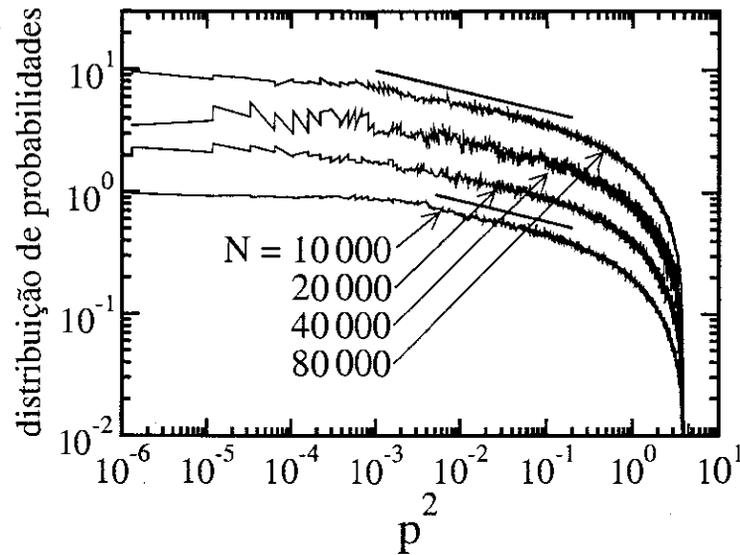


Figura 7.18: Distribuição de probabilidades de velocidades do modelo anisotrópico, com diferentes números de partículas e $E/N = 0.65$, $\alpha = 0$, $L = 1$, $\epsilon = 0$, no regime meta-estável. Exceto para $N = 10\,000$, as curvas estão deslocadas ao longo das ordenadas, para melhor visualização. $N = 10\,000$ com 226 realizações avaliadas no tempo $t = 1\,000$; $N = 20\,000$ com 38 realizações no tempo $t = 3\,000$; $N = 40\,000$ com 7 realizações no tempo $t = 3\,000$; $N = 80\,000$ com 40 realizações no tempo $t = 5\,000$.

ângulos nulos. Uma delas exhibe o patamar meta-estável, com transição para o patamar estável, enquanto outra já parte imediatamente para o patamar estável. Por esta razão, é necessário fazermos médias sobre várias realizações.

Diferentes modelos de rotores (isotrópico, anisotrópico com termo local, anisotrópico com termo de interações) originam o fenômeno do regime meta-estável. Esses modelos têm em comum a interação de longo alcance (particularmente nos casos estudados, alcance infinito). Decorre, então, a conclusão que a fonte, ou melhor dizendo, pelo menos uma das fontes, da existência do regime meta-estável que viola a mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs, é o alcance das interações.

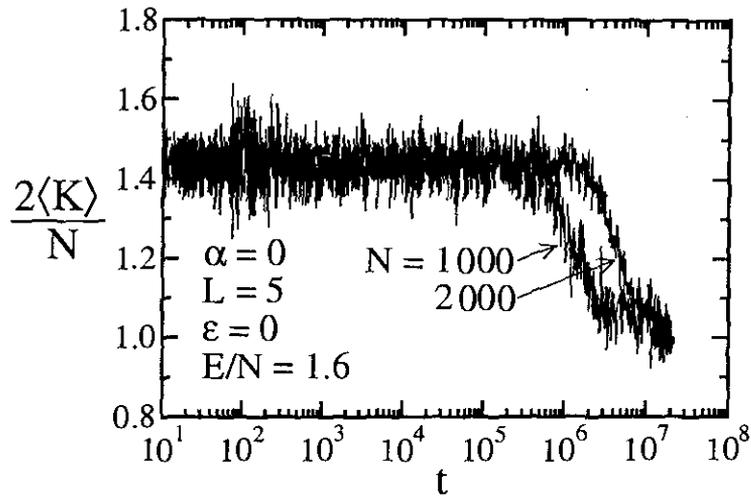


Figura 7.19: Evolução temporal da energia cinética média por partícula para $L = 5$. $\alpha = 0$, $\epsilon = 0$, $E/N = 1.6$. Apenas uma realização para ambos $N = 1000$ e $N = 2000$. Compare com a Fig. 7.12 para observar o aumento da duração do patamar meta-estável com o aumento do termo anisotrópico L .

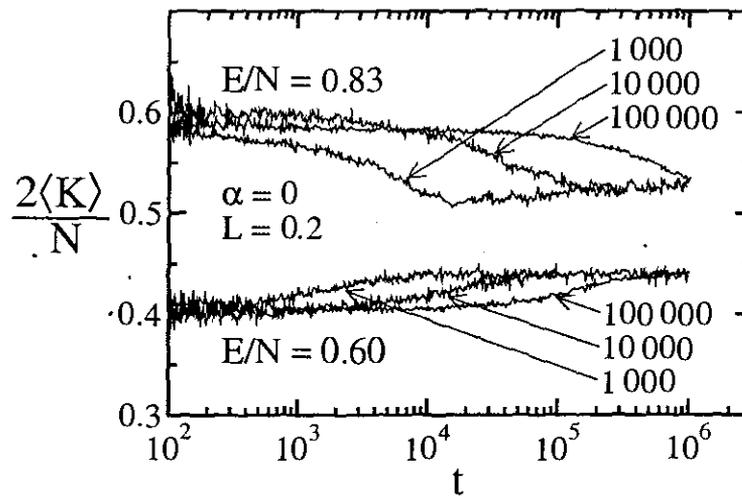


Figura 7.20: Evolução temporal da energia cinética média por partícula para modelo anisotrópico com $L = 0.2$, em duas energias por partícula diferentes, e diferentes valores de N . A energia cinética média por partícula do regime meta-estável pode ser maior ou menor que a aquela do regime Boltzmanniano. Número de realizações para $E/N = 0.83$: 26 ($N = 1000$), 2 ($N = 10000$), 1 ($N = 100000$); para $E/N = 0.60$: 41 ($N = 1000$), 3 ($N = 10000$), 1 ($N = 100000$).

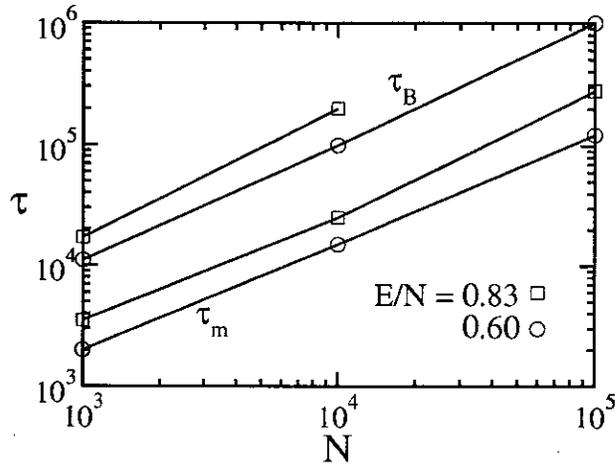


Figura 7.21: Tempos de transição entre regimes meta-estável e estável, para $L = 0.2$, com $E = 0.60$ e $E = 0.83$. τ_B : tempo de chegada no regime Boltzmanniano; τ_m : tempo que $2\langle K \rangle/N$ assume valor intermediário entre os patamares. As inclinações variam entre 0.9 e 1.0.

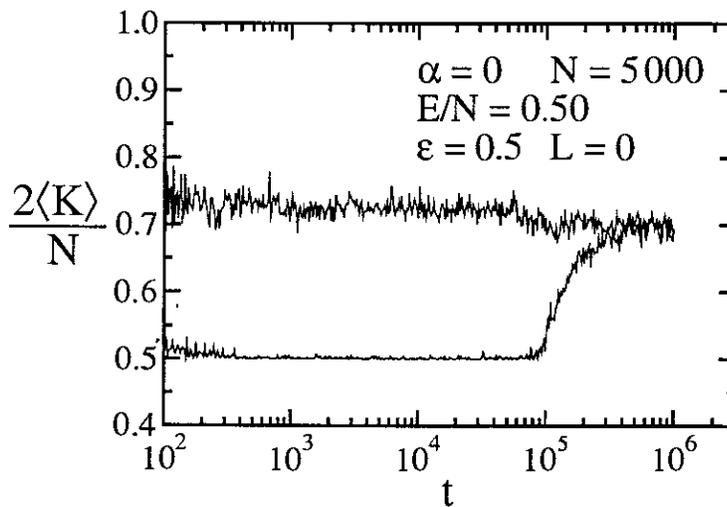


Figura 7.22: Duas realizações similares, uma delas apresentando o patamar meta-estável, e a outra não, evidenciando que não é suficiente tomarmos os limites na ordem $\lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty}$ para que se desenvolva o regime meta-estável. A diferença entre as realizações está apenas na configuração inicial de velocidades (ambas aleatórias com distribuição *water bag*).

7.3 Gases do tipo Lennard-Jones

7.3.1 Modelo

Nós investigamos [180] um gás bidimensional confinado em uma caixa de comprimento linear L , definido pelo Hamiltoniano (escrito na forma formalmente extensiva, i.e., de acordo com a Eq. (7.14))

$$\mathcal{H}' = K + \frac{V}{\tilde{N}} + V_{paredes}. \quad (7.33)$$

K é a energia cinética, com sua definição usual,

$$K = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N p_i^2,$$

m é a massa de uma partícula (consideramos todas idênticas) e p_i o momento da partícula i . O potencial de interação é dado pela soma de potenciais de interação entre pares de partículas,

$$V = \sum_{i<j}^N v(r_{ij}), \quad (7.34)$$

sendo r_{ij} a distância entre os centros das partículas i e j , e $V_{paredes}$ o potencial das paredes (fronteiras) do sistema. Adotamos paredes moles, cujo potencial repulsivo de curto alcance é dado por

$$V_{paredes} = \sum_{w=1}^4 \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{r_{iw}} \right)^{12}. \quad (7.35)$$

A parede é identificada pelo índice $w = 1, \dots, 4$ e r_{iw} é a distância da partícula i até a parede w (caixa quadrada). Este termo é necessário para assegurar que as partículas fiquem confinadas dentro da caixa. Além disso, é necessário que ele faça parte do Hamiltoniano do sistema, para que a energia total seja conservada (trabalhamos no *ensemble* micro-canônico). Paredes do tipo espelho não conservam a energia total, exceto no caso de gás ideal.

O potencial de interação entre duas partículas, $v(r_{ij})$, é dado por uma combinação entre um termo repulsivo e um termo atrativo,

$$v(r_{ij}) = C_\alpha \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^\eta - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^\alpha \right] \quad (0 \leq \alpha < \eta), \quad (7.36)$$

sendo

$$C_\alpha = \epsilon \frac{(\eta^\eta / \alpha^\alpha)^{1/(\eta-\alpha)}}{(\eta - \alpha)}. \quad (7.37)$$

Este potencial foi proposto por Mie, em 1903 [181, 182] e mais tarde amplamente estudado um importante caso particular, com $\eta = 12$ e $\alpha = 6$, por Lennard-Jones [183]. London [184], usando teoria de forças de dispersão, mostrou que moléculas esféricas apolares apresentam potência para o termo de atração $\alpha = 6$, mas não existe um valor teórico para a potência do termo de repulsão. Usualmente se usa $\eta = 12$, valor que adotamos no presente trabalho (caso adotássemos outro valor para η , consistentemente, embora não necessariamente, alteraríamos a potência do potencial de repulsão das paredes, Eq. (7.35)).

σ é o diâmetro de uma partícula. Como estamos considerando partículas idênticas, σ representaria também a distância de máxima aproximação entre duas partículas, caso o potencial repulsivo fosse infinito. Estamos considerando partículas moles, portanto é possível uma (pequena) deformação delas durante o choque. ϵ é o parâmetro que caracteriza a unidade que a energia é medida. A constante C_α garante que o poço de potencial tenha profundidade $(-\epsilon)$ para qualquer α . A posição do poço se localiza em

$$r_{min} = \left(\frac{\eta}{\alpha} \right)^{\frac{1}{\eta-\alpha}} \sigma. \quad (7.38)$$

Adotamos unidades nas quais $\sigma = \epsilon = m = 1$. A Figura 7.23 ilustra o comportamento da Equação (7.36) (com $\eta = 12$), para vários valores de α , e a Figura 7.24 apresenta a dependência de r_{min} com α (Eq. (7.38)).

Este modelo é uma variante do utilizado na Ref. [185]. É importante notar que a variável que controla o alcance das interações, r_{ij} , é a mesma variável dinâmica do problema. Já no problema dos rotores clássicos, tratado na Seção 7.2, o alcance das interações

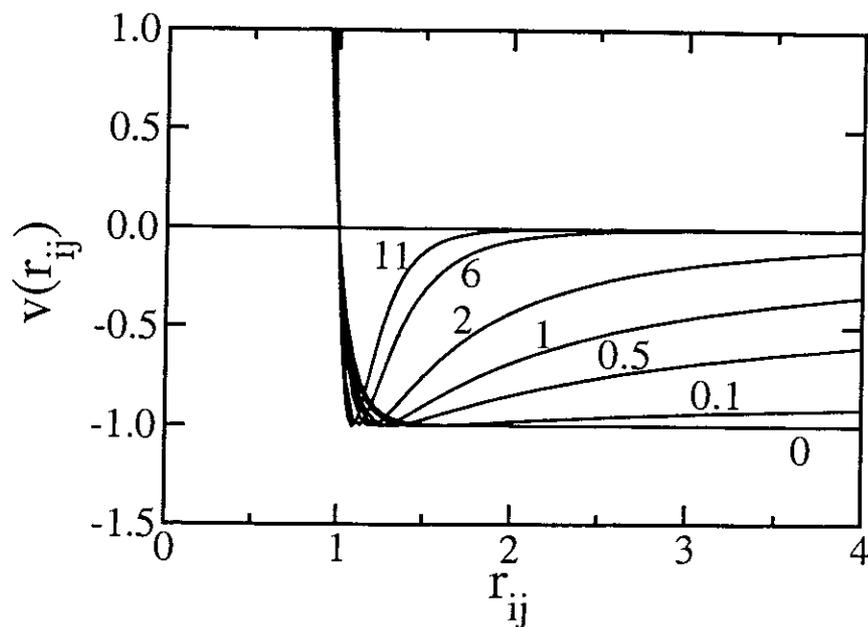


Figura 7.23: Potencial de Mie, para vários valores do termo atrativo α .

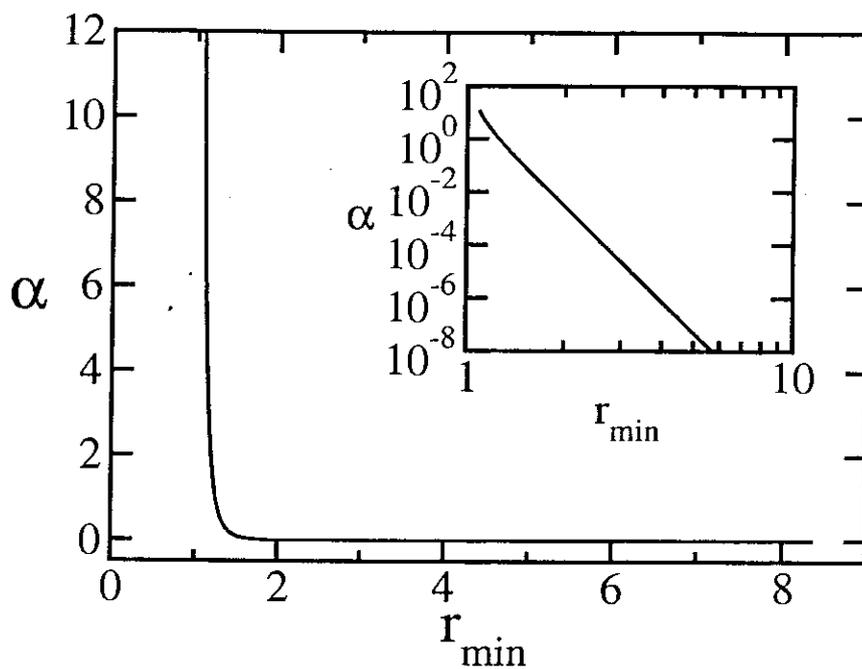


Figura 7.24: Posição do poço do potencial de Mie, r_{min} (em unidades de σ) em função de $0 \leq \alpha < 12$. Detalhe: escala log-log.

é controlado pelas posições *fixas* das partículas no retículo, enquanto as variáveis dinâmicas são os ângulos.

Como tratamos um gás bidimensional ($d = 2$), as interações descritas pelo potencial (7.36) são de curto alcance para $\alpha > 2$, e de longo alcance para $\alpha < 2$ (vide Seção 7.1).

Procedimento Computacional

O procedimento adotado para este sistema gasoso é muito similar ao adotado para o sistema de rotores, Sub-seção 7.2.2, por esta razão não vamos utilizar uma Sub-seção adicional aqui. As características específicas, aplicáveis apenas para o modelo de rotores são facilmente identificadas (cálculo de magnetização, ângulos etc.). Para este sistema gasoso, as posições iniciais utilizadas são partículas num retículo triangular, que corresponde ao mínimo de energia potencial (o programa implementado também permite posições distribuídas aleatoriamente). As condições de contorno, já comentamos, partículas confinadas em uma caixa. Os passos de integração utilizados neste sistema gasoso variam na faixa $dt = 0.005-0.02$, de acordo com o caso (energias mais elevadas requerem passos de integração menores).

7.3.2 Resultados

Construímos a curva calórica para dois casos deste gás bidimensional ($d = 2$): um com interações de longo alcance ($\alpha = 1$) e, para comparação, outro com interações de curto alcance ($\alpha = 6$). Para tanto, acompanhamos a evolução temporal da variável $\langle K \rangle / N$, que é equivalente à temperatura, dentro do formalismo usual de Boltzmann-Gibbs. Inicialmente, como descrevemos no item **Procedimento Computacional** da Sub-seção anterior, toda a energia está na forma de energia cinética, ou seja, as partículas estão dispostas em um retículo triangular.

A Figura 7.25 ilustra a evolução temporal da energia cinética média por partícula, para um sistema com interações de curto alcance ($\alpha = 6, d = 2$). Note-se que no instante inicial, o sistema está em seu mínimo de energia potencial, ou seja, $\langle K \rangle / N = E / N$. Percebe-se um transiente, e finalmente o estado estacionário de equilíbrio (neste caso, de Boltzmann-

Gibbs). A Figura 7.26 ilustra evolução semelhante para sistema com interações de longo alcance ($\alpha = 1, d = 2$).

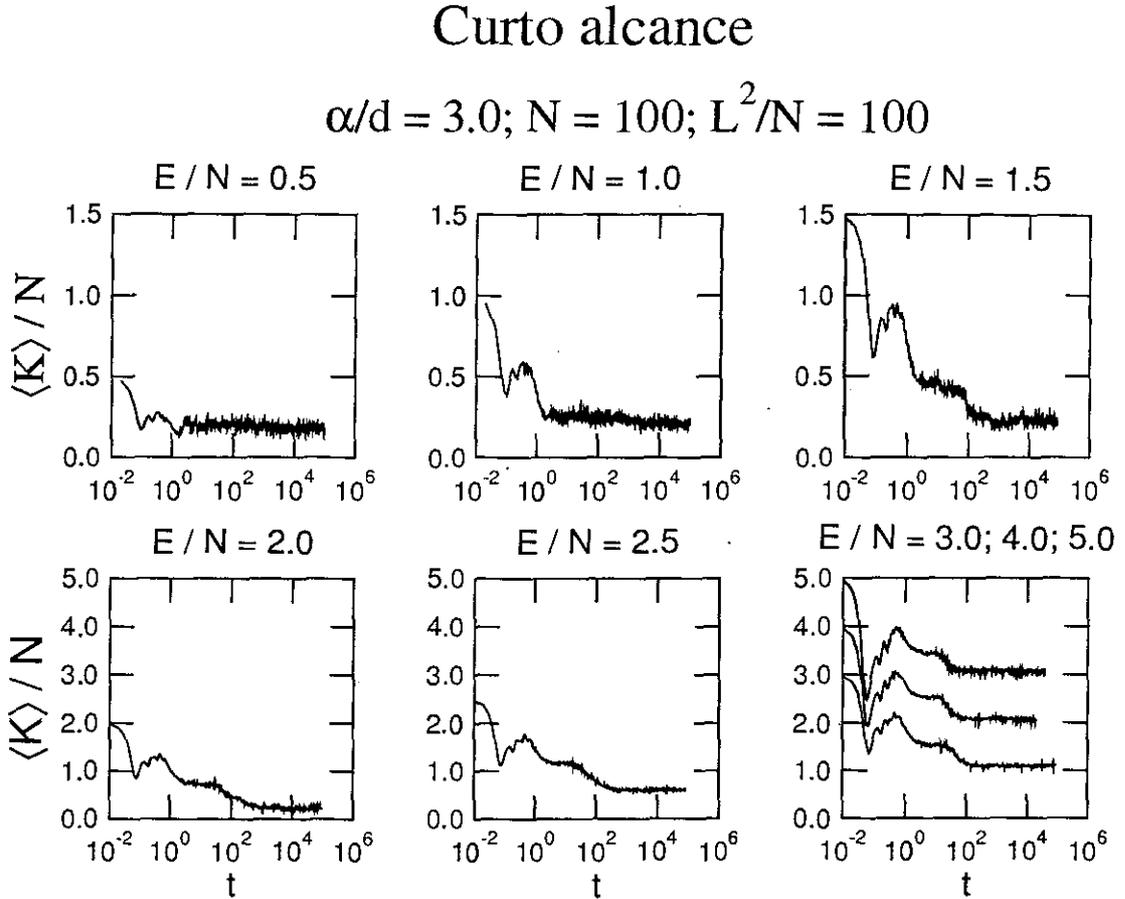


Figura 7.25: Evolução temporal da energia cinética média para um gás com interações de curto alcance, para diferentes valores de energia total por partícula, E/N . Note-se a escala temporal logarítmica. Em todos os casos, $\alpha/d = 3$, $N = 100$ e $L^2/N = 100$.

A partir destas Figuras 7.25 e 7.26, avaliamos as curvas calóricas, apresentadas na Figura 7.27, através de médias temporais, tomadas dentro da região estacionária. A Fig. 7.27(b) mostra claramente uma região de calor específico negativo. Esse fenômeno é usual em sistemas com este tipo de interações de longo alcance. Isto não é observado para o gás com interações de curto alcance, Fig. 7.27(a).

As Figuras 7.28 e 7.29 ilustram o espaço de fases mono-particular, i.e., a projeção do espaço de fases do sistema no sub-espaço de apenas uma partícula, para dois casos:

Longo alcance

$$\alpha/d = 0.5; N = 100; L^2/N = 100$$

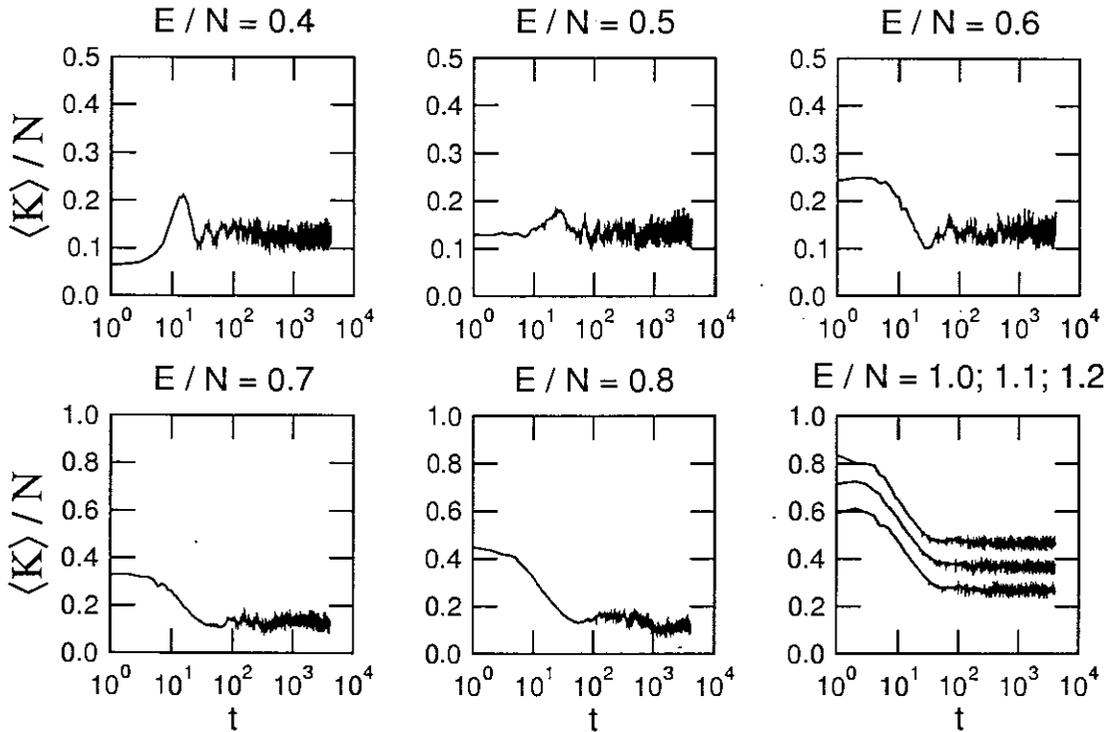


Figura 7.26: Evolução temporal da energia cinética média para um gás com interações de longo alcance, para diferentes valores de energia total por partícula, E/N . Note-se a escala temporal logarítmica. Em todos os casos, $\alpha/d = 1$, $N = 100$ e $L^2/N = 100$.

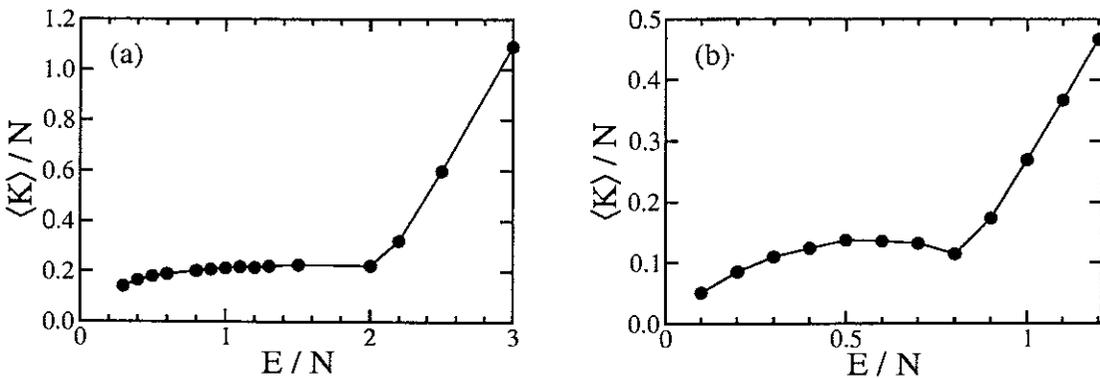


Figura 7.27: Curva calórica para gases com interações de (a) curto e (b) longo alcance. Linhas são apenas guias para os olhos.

energia abaixo do ponto de cúspide (Fig. 7.28), e energia acima deste ponto (Fig. 7.29). Estamos denominando por *ponto de cúspide* a energia de transição entre fases, identificada nas Figuras 7.27 pelos pontos de descontinuidade. No caso de interações de longo alcance, a curva apresenta uma forma de cúspide. Alternativamente podemos denominar *ponto crítico*. Analisamos apenas os sub-espacos de posições (q_x vs. q_y) e de posições-momentos, (q_x vs. p_x). Observamos que, para energias sub-críticas, algumas partículas de sistemas com interações de curto alcance formam vários pequenos aglomerados (visualmente identificáveis na Figura q_x vs. q_y , e, na Figura q_x vs. p_x , eles são identificados por filamentos verticais), enquanto outras ficam dispersas no espaço disponível. Em sistemas com interações de longo alcance, ocorre um único aglomerado central, que contém muitas partículas, e as demais partículas se encontram dispersas. Quando comparamos as figuras posições-momento para os casos de curto e de longo alcance, percebemos que os momentos são levemente menores (em módulo) quando estão presentes interações de longo alcance, o que é esperado — tais interações, atrativas, funcionam como uma espécie de freio para as partículas. Em energias super-críticas, Figura 7.29, os casos de curto e de longo alcance são assemelhados. Os menores momentos (em módulo) para interações de longo alcance continuam presentes.

Analisamos o efeito do tamanho do sistema sobre a curva calórica, aumentando o número de partículas N , mantendo constante a área específica, L^2/N , para um sistema com interações de longo alcance. A Figura 7.30 apresenta os resultados. Observamos que a existência de uma região com calor específico negativo permanece com o aumento de N . Ocorre um deslocamento da energia da cúspide para a direita (regiões de maiores energias, vide Detalhe da Fig. 7.30(a)), de acordo com uma lei de potência. A energia total escala com E/N^{1+x} , com $x = 0.0876$. Este valor pequeno de x não é facilmente distinguível (numericamente falando) de uma possível correção logarítmica oculta na escala de lei de potência introduzida por \tilde{N} . Este efeito não foi detectado no modelo de rotores clássicos (Seção 7.2, e também em [174]) e pode ser devido às condições de contorno (no modelo de rotores, as condições usadas são periódicas, enquanto no presente modelo de gás, as partículas estão confinadas numa caixa de tamanho finito). A energia cinética média por

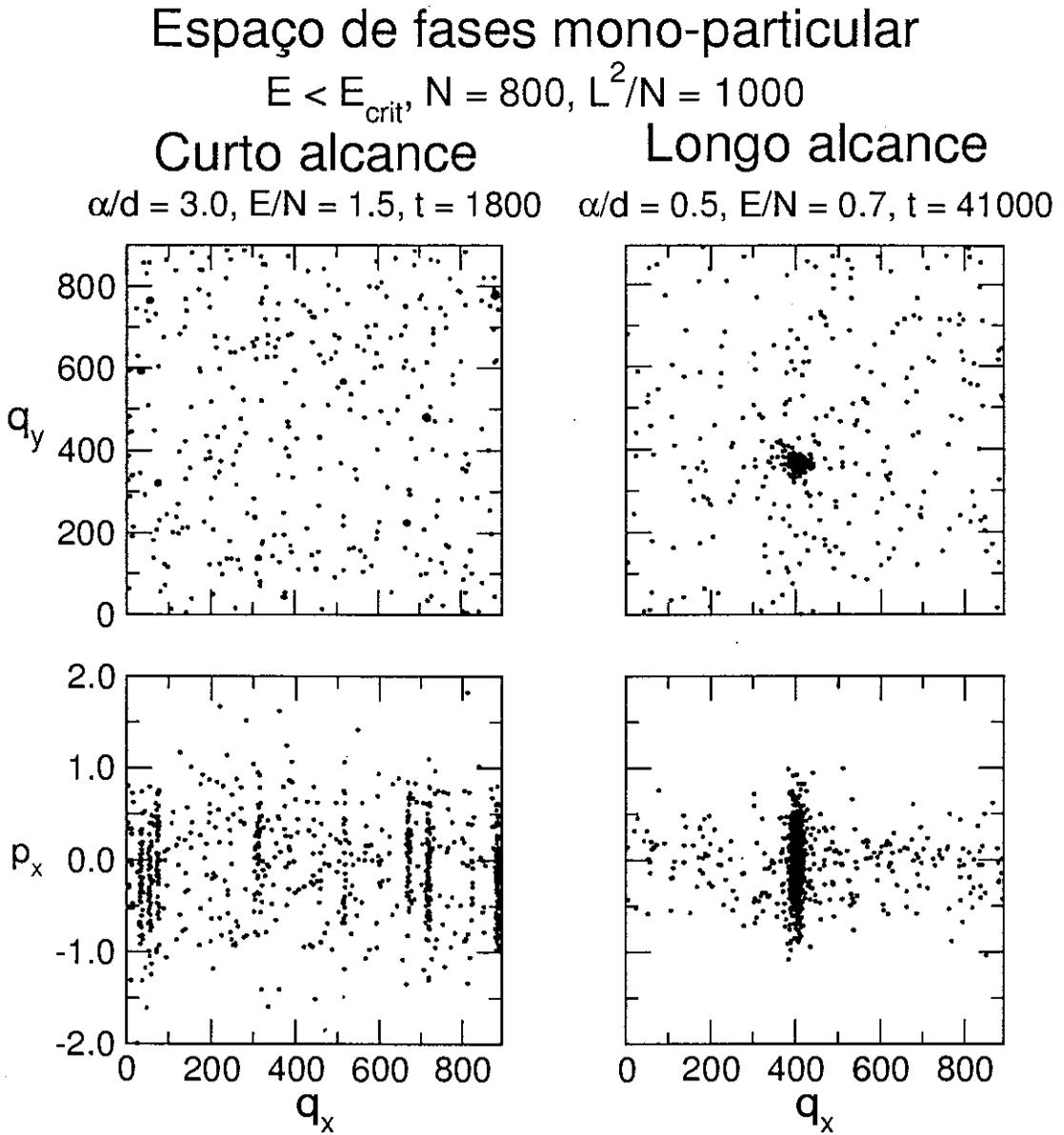


Figura 7.28: Espaço de fases mono-particular na região sub-crítica. São apresentados os sub-espacos de posições (q_x vs. q_y) e de posições-momentos (q_x vs. p_x), para ambos os casos de interações de curto e de longo alcance. As Figuras representam um *flash* em um tempo específico. $N = 800$ e $L^2/N = 1000$.

partícula também apresenta um efeito de escala, embora com uma acurácia menor que na energia total. O colapso dos dados na ordenada é possível escalando os máximos das

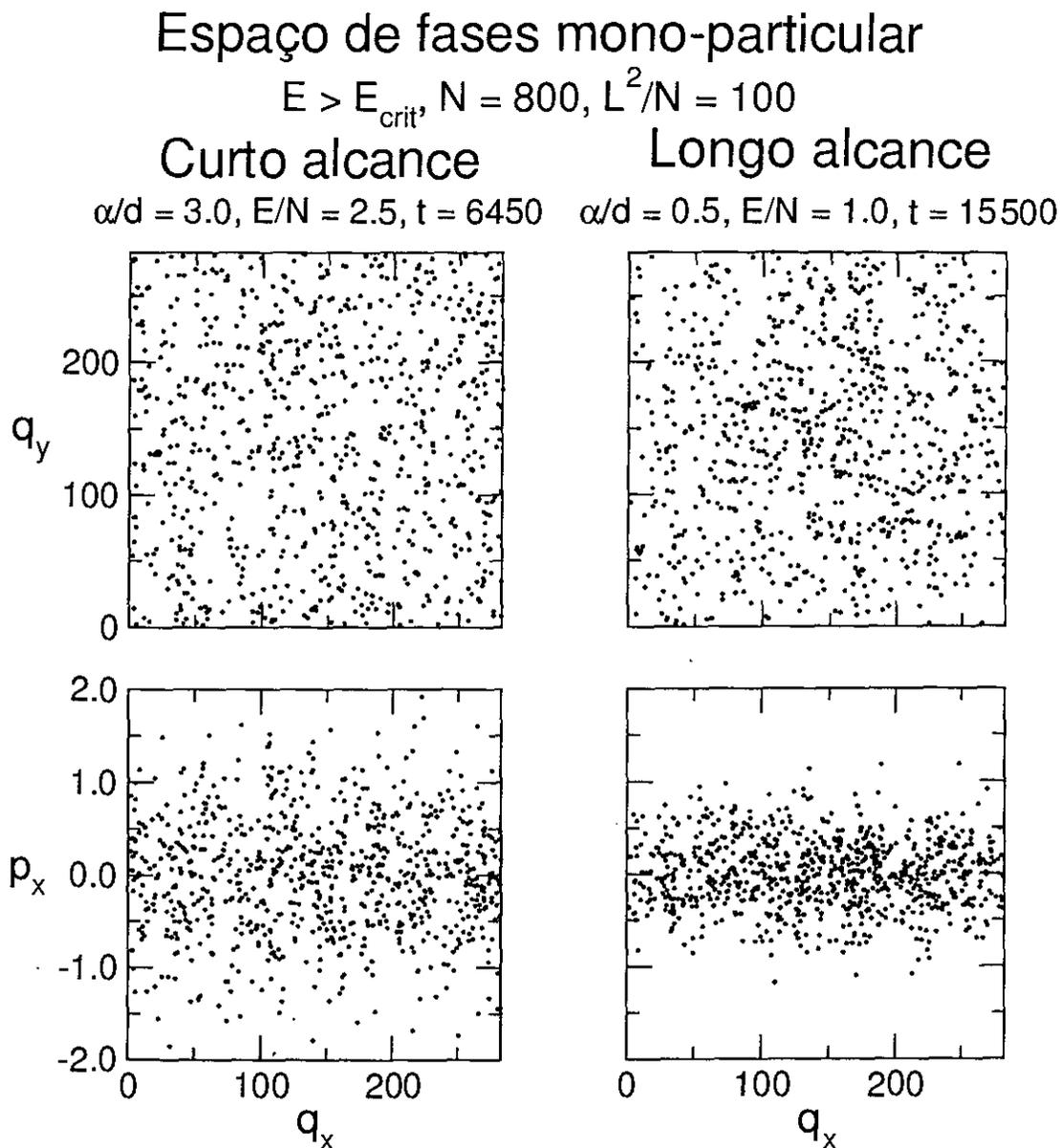


Figura 7.29: Espaço de fases mono-particular na região super-crítica. São apresentados os sub-espacos de posições (q_x vs. q_y) e de posições-momentos (q_x vs. p_x), para ambos os casos de interações de curto e de longo alcance. As Figuras representam um *flash* em um tempo específico. $N = 800$ e $L^2/N = 100$.

curvas (para energias inferiores à crítica) de acordo com

$$T_{max}(N) \sim T_{max}(\infty) - a/N^y \quad (T \equiv) K \langle /N \rangle, \quad (7.39)$$

com $y = 0.0379$, novamente um valor bastante pequeno. A Figura 7.30(b) apresenta os

dados colapsados.

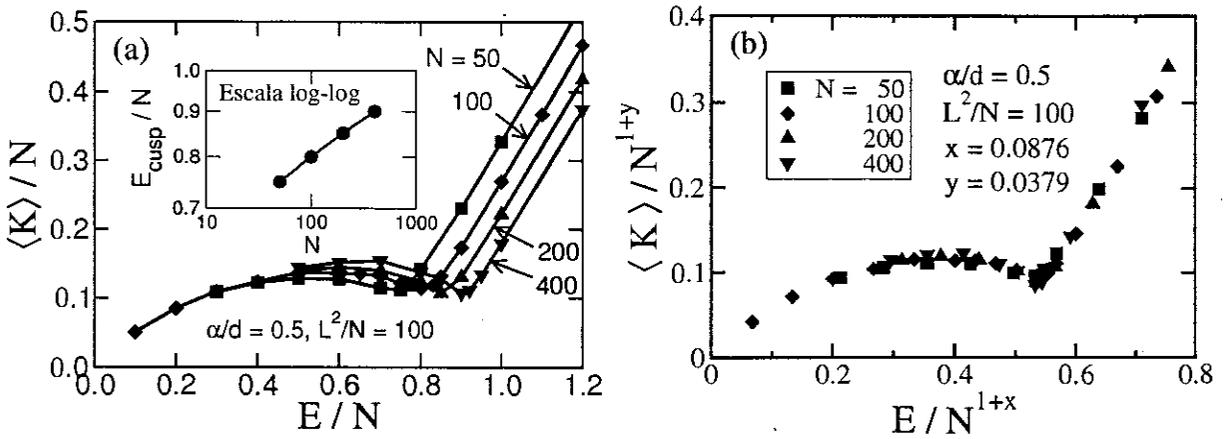


Figura 7.30: Efeito do número de partículas sobre a curva calórica, para um sistema com interações de longo alcance. ($N = 50, 100, 200, 400$). (a) Dados não colapsados. Detalhe: Crescimento da energia por partícula do ponto de cúspide com o aumento do sistema (Escala log-log). Inclinação: 0.0876. (b) Dados colapsados. A energia total por partícula E/N escala com $N^{0.0876}$, e a energia cinética média por partícula, $\langle K \rangle / N$, escala com $N^{0.0379}$.

Analisamos também o efeito da densidade (ou, equivalentemente, da área específica) em um sistema com interações de longo alcance; a Figura 7.31 apresenta os resultados. O aumento da densidade (diminuição de L^2/N) diminui a região de calor específico negativo. Em densidades bastante elevadas (no caso, $L^2/N = 10$) este efeito já desaparece completamente.

Finalmente analisamos a distribuição de velocidades. É importante termos em mente uma diferença essencial entre o modelo dos rotores (Seção 7.2) e este gás: naquele, abordamos dois casos limite, interações apenas entre primeiros vizinhos e interações de alcance infinito. Isto faz que os tempos de execução sejam de ordem N . No presente modelo de gás, é necessário considerar as interações de cada partícula com todas as demais (devido ao alcance longo, mas não infinito, das interações), e assim os tempos de execução crescem com N^2 . Isto implica em programas muito mais lentos, número menor de amostragens, resultados mais imprecisos. Em consequência disto, os resultados que obtivemos para distribuições de velocidades, são incipientes e não conclusivos.

A Figura 7.32 apresenta nossos resultados, para dois casos: curto ($\alpha = 6$) e longo

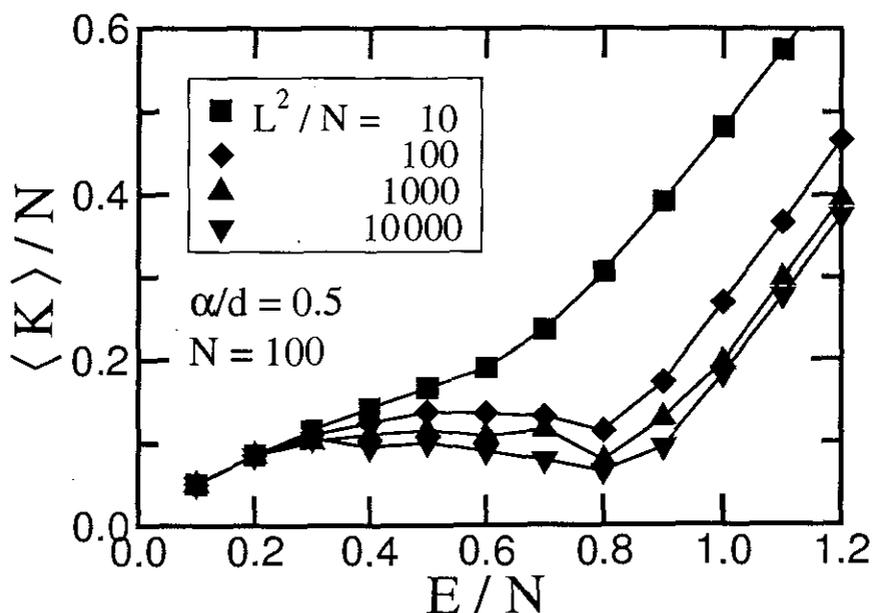


Figura 7.31: Efeito da densidade (ou, inversamente, L^2/N) sobre a curva calórica, para um sistema com interações de longo alcance ($\alpha = 1$, $d = 2$). Em todos os casos, $N = 100$.

($\alpha = 1$) alcances. Ilustramos três tamanhos de sistemas, $N = 800$, 1600 , 2200 . Apenas para $N = 1600$ utilizamos linhas pontilhadas, para uma melhor visualização. Verificamos que na Fig. 7.32(a), os três sistemas estão aproximadamente superpostos, e as linhas, imaginamos, se aproximariam de retas, com um número adequado de amostragens (as flutuações presentes são muito grandes), o que indicaria distribuição Boltzmanniana (escala x: linear, y: logarítmica). Já na Fig. 7.32(b), percebemos que as curvas se deslocam para cima à medida que N cresce. Isto indica que (i) o limite termodinâmico ainda não foi alcançado, e (ii) pode ser um indício que, neste limite, a curva não seja uma reta, i.e., o comportamento não seja de Boltzmann-Gibbs. Mas, como dissemos, são suposições, pois a precisão dos resultados não permitem resultados conclusivos.

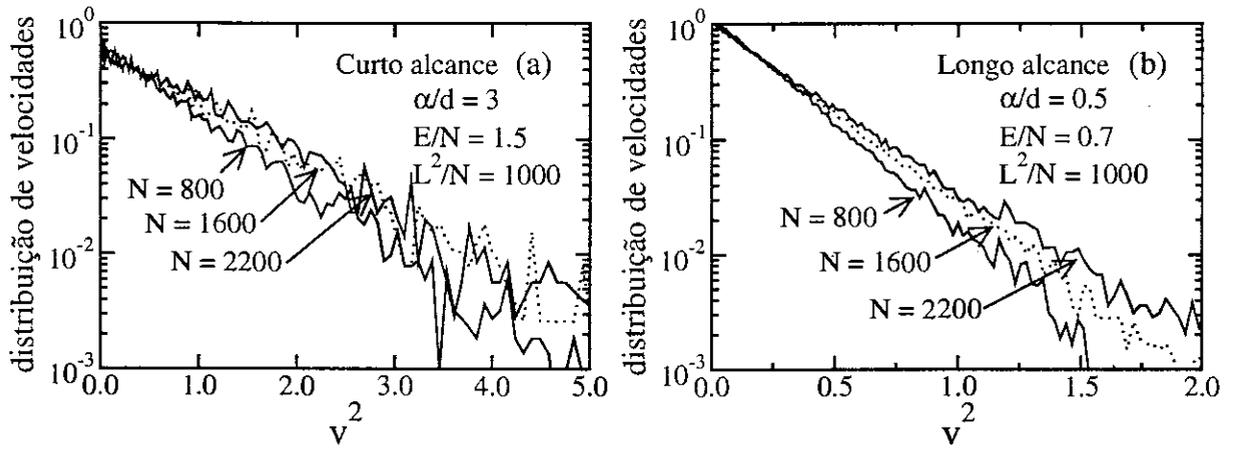


Figura 7.32: Distribuição de velocidades para gases tipo Lennard-Jones, na região sub-crítica. Abscissa: $v^2 = v_x^2 + v_y^2$ (escala linear); ordenada: distribuição de probabilidades de velocidades (escala logarítmica). (a) Sistema com interações de curto alcance ($\alpha/d = 3$), $E/N = 1.5$; (b) Sistema com interações de longo alcance ($\alpha/d = 0.5$), e $E/N = 0.7$ (região sub-crítica dentro da faixa de calor específico negativo). Em ambos os casos, $L^2/N = 1000$. Número de partículas $N = 800$ (linha cheia), $N = 1600$ (linha pontilhada) e $N = 2200$ (linha cheia). O objetivo de usar a linha pontilhada apenas para $N = 1600$ é tornar as curvas mais facilmente distinguíveis, especialmente na Fig. (b).

Capítulo 8

Outros exemplos de distribuições generalizadas

Neste Capítulo vamos apresentar alguns exemplos de distribuições não-extensivas¹. Inicialmente, na Seção 8.1, tratamos brevemente as leis de potência e outras distribuições, já conhecidas há muito tempo. Em seguida, na Seção 8.2, introduzimos as distribuições emergentes da mecânica estatística não-extensiva. Uma delas é a própria distribuição não-extensiva, que decorre dos métodos variacionais. Apresentamos outras generalizações bi-paramétricas, também não-extensivas. Estas seções têm um caráter didático, ou seja, não apresentam contribuição nossa, exceto em pequenos detalhes da apresentação. Naturalmente, como de costume, qualquer falha é de nossa responsabilidade. Seu objetivo é localizar o problema para as duas Seções finais, 8.3 e 8.4, onde apresentamos alguns exemplos de sistemas físicos e sistemas sociais nos quais as equações apresentadas nas duas primeiras Seções se ajustam aos dados experimentais dentro de erros aceitáveis.

A lista de exemplos que apresentamos não é abrangente. Ajustes semelhantes tem sido encontrados em uma variedade grande de sistemas, que não abordaremos. Apenas arrolamos alguns: dentre os trabalhos mais impressionantes e promissores são os que tratam a turbulência. Destacam-se as abordagens de Christian Beck ([160, 161, 186] e referências lá contidas) e dos Arimitsu [162, 163]. Também entre os pioneiros nesta abordagem não-extensiva para a turbulência se encontra o trabalho de Fernando Ramos, Camilo Rodrigues Neto e Reinaldo Rosa, do Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais

¹Estamos denominando por distribuições não-extensivas as distribuições provenientes da mecânica estatística não-extensiva.

[187, 188], inclusive fazendo conexões com mercados financeiros. Destacamos também o trabalho de re-associação em hemo-proteínas, [189], cujo desenvolvimento teórico em grande parte serve de base para a Seção 8.2. Ainda, movimento de organismos vivos [190], lingüística quantitativa [191] (estendendo a célebre lei de Zipf), tráfego de informações na Internet [192], aglomerações urbanas [193], distribuição de gols em campeonatos de futebol [194], citações de trabalhos científicos [195, 196], distribuições de cestas em campeonatos de basquete, vítimas de ciclones, nomes comerciais de medicações e comprimentos de rodovias [197]. Uma bibliografia bastante mais ampla e constantemente atualizada, não apenas incluindo exemplos desse tipo, mas sobre toda a literatura não-extensiva em geral, pode ser encontrada em [26].

Muitos exemplos de sistemas que podem ser razoavelmente bem descritos dentro do formalismo não-extensivo aparecem com freqüência na literatura. Talvez por desconhecimento, esta abordagem não é utilizada, e os autores se limitam e se satisfazem em descrever apenas o comportamento assintótico do tipo lei de potência, que esses sistemas costumam apresentar. Nas Seções 8.3 e 8.4 veremos casos típicos.

8.1 Leis de Potência e outras distribuições

Leis de distribuição constituem ferramenta básica em qualquer tratamento estatístico. Na maioria das vezes é impossível, ou mesmo desnecessário, o conhecimento completo, i.e., termos informações sobre todos os graus de liberdade, de sistemas constituídos por um grande número de elementos. As distribuições carregam o que é factível conhecer destes sistemas.

A mais famosa, e talvez a conhecida há mais tempo, seja a distribuição Gaussiana (ou normal). E, sem dúvida, uma das mais importantes, presente em uma infinidade de sistemas naturais:

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2}, \quad (8.1)$$

sendo $p(x)$ a densidade de probabilidade, i.e., $p(x) dx$ é a probabilidade de se encontrar a variável no intervalo entre x e $x + dx$, μ o seu valor médio e σ o desvio-padrão. Não vamos

listar aqui exemplos onde ela é observada — a literatura já o faz de forma muito ampla. Apenas como um exemplo de sua “popularidade”, a Equação (8.1) (bem como um gráfico e um retrato de Gauss) estava presente na extinta cédula de 10 marcos alemães. Einstein [198] demonstrou que a Gaussiana estava ligada à mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs.

Durante muito tempo persistiu a crença que a validade da distribuição Gaussiana seria praticamente universal. Uma frase, retirada do livro *Caos*, de James Gleick [199] ilustra isto (Figura 8.1). Mas também não é recente o conhecimento que a Gaussiana, embora

THE
NORMAL
LAW OF ERROR
STANDS OUT IN THE
EXPERIENCE OF MANKIND
AS ONE OF THE BROADEST
GENERALIZATIONS OF NATURAL
PHILOSOPHY ◊ IT SERVES AS THE
GUIDING INSTRUMENT IN RESEARCHES
IN THE PHYSICAL AND SOCIAL SCIENCES AND
IN MEDICINE AGRICULTURE AND ENGINEERING ◊
IT IS AN INDISPENSABLE TOOL FOR THE ANALYSIS AND THE
INTERPRETATION OF THE BASIC DATA OBTAINED BY OBSERVATION AND EXPERIMENT

Figura 8.1: Apologia à Gaussiana. Figura refeita de [199].

todos seus indiscutíveis méritos e ubiqüidade, não pode ter *status* tão elevado quanto sugere a Figura 8.1. Não vamos fazer um apanhado histórico das distribuições (Poisson, Lorentz, Student ...). Vamos nos deter em uma família delas, que tem especial interesse para os sistemas não-extensivos que temos tratado: as leis de potência. Também não é recente o conhecimento da presença de leis de potência na natureza. Talvez a primeira percepção tenha sido de Vilfredo Pareto, engenheiro e economista italiano (1848–1923) [200, 201], analisando distribuições de renda e riqueza de populações, concluiu que a probabilidade $p(x) dx$ de um indivíduo ter um rendimento compreendido entre x e $x + dx$ obedece a

$$p(x) \propto \frac{1}{x^{\alpha+1}}, \quad (8.2)$$

sendo $1 \leq \alpha \leq 2$ ($p(x)$ é a densidade de probabilidade). Quando mais socializada a economia, maior o valor de α . É comum a lei de Pareto ser apresentada na forma da

distribuição acumulada inversa,

$$\begin{aligned} P(\geq x) &= \int_x^{\infty} p(y) dy \\ &= \frac{1}{x^\alpha} \end{aligned} \quad (8.3)$$

onde $P(\geq x)$ é a probabilidade de um indivíduo ter um rendimento igual ou superior a x .

A lei de Pareto tem sido mais amplamente divulgada recentemente como a lei dos 80/20; mais ou menos diz que 80% dos lucros de um empreendimento provêm de 20% dos empregados, e o restante 20% dos lucros são originados pelo restante 80% dos empregados; ou ainda 80% de um trabalho leva 20% do tempo, e os restantes 20% consomem 80% do tempo; ou ainda mais 80% das terras na Itália eram (no tempo de Pareto) de propriedade de 20% da população; 80% das reclamações de uma empresa são provenientes de 20% de seus produtos, etc. (Essa proporção é obtida com $\alpha = 1$.)

Um dos problemas, ou inquietudes, que uma lei de potência traz é que ela não apresenta média, i.e.,

$$\int_0^{\infty} p(x) x dx \rightarrow \infty, \quad (8.4)$$

se $p(x)$ for dada pela Equação (8.2), com $\alpha \geq 1$ (coisa que não acontece com a Gaussiana, Equação (8.1)). Contorna-se esse problema admitindo-se (i) ou que alguns fenômenos não apresentam uma escala característica, e seriam possíveis (com probabilidades não desprezivelmente pequenas, quanto seriam as probabilidades Gaussianas) eventos em todo o espectro de variação de x , ou (ii) que a lei de potência não é válida para todo o espectro de variação de x . Efetivamente é esta segunda possibilidade que se observa em muitos sistemas — no caso de distribuição de riquezas, p. ex., a lei de Pareto costuma ser observada apenas na parcela mais rica da população — e assim também para vários outros sistemas (veremos exemplos nas Seções seguintes); as Equações (8.2)–(8.3) descrevem comportamentos assintóticos, para valores elevados de x .

Outros exemplos “clássicos” e pioneiros na observação de leis de potência na natureza são a distribuição de frequência de terremotos em função de sua intensidade, conhecida

como lei de Gutenberg-Richter [202] e a distribuição de frequência de uso de palavras em obras literárias, conhecida como lei de Zipf [203] (apesar de diferentes denominações, são todas essencialmente a mesma lei de Pareto). O livro de Per Bak [2] tem uma introdução bastante didática sobre leis de potência, e o livro de Zipf, além da famosa abordagem quantitativa da lingüística, traz diversos exemplos sociais nos quais são verificadas leis de potência, como, p. ex., distribuição de populações nas 100 maiores metrópoles estadunidenses, (no ano 1940), no Império Austro-Húngaro (em 1910), na Índia (1911 e 1931), cidades européias com mais de 100 000 habitantes (em 1880 e 1920), e ainda, número de estabelecimentos em função do tipo de serviço (tais como barbearias, lojas de limpeza, serviços funerários ...) (E.E.U.U. em 1939), número de casamentos em função da distância das residências dos noivos (Filadélfia, 1931). Em todos esses exemplos, Zipf verificou a distribuição de Pareto, Equação (8.3), com $\alpha \simeq 1$. Neste último exemplo que citamos, os casamentos na Filadélfia, ele encontrou $\alpha \simeq 0.8$, o que o levou à curiosa conclusão que a distância gera encantamento (“distance lends enchantment”).

Estávamos dizendo, as leis de potência freqüentemente são observadas nas *caudas* das distribuições, e não em todo o espectro. Dependendo do sistema em análise, costuma-se adotar outras leis para as regiões de valores pequenos ou intermediários de x . Uma delas é a distribuição log-normal, proposta por Gibrat [204], para descrever a região intermediária da distribuição de renda de populações:

$$p(x) = \frac{1}{x\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{\log^2(x/x_0)}{2\sigma^2}\right], \quad (8.5)$$

sendo x_0 a média e σ o desvio-padrão. Trata-se de uma distribuição a dois parâmetros. Mas, em muitos sistemas, ela é hábil para descrever apenas a região intermediária. Decidir onde começa e onde termina esta região segue critérios de certo modo subjetivos, e isto corresponde à introdução de dois parâmetros “ocultos” adicionais.

Outra lei alternativa que costuma ser usada é a denominada exponencial esticada (ou distribuição de Weibull),

$$p(x) = c\left(\frac{x^{c-1}}{x_0^c}\right) \exp[-(x/x_0)^c] \quad (c < 1), \quad (8.6)$$

cuja distribuição acumulada fica

$$P(\geq x) = \exp[-(x/x_0)^c]. \quad (8.7)$$

Mais uma distribuição bastante difundida é a denominada lei de Zipf-Mandelbrot [130], que é uma generalização da lei de Pareto, na forma

$$P(\geq x) \propto \frac{1}{(a+x)^\alpha}. \quad (8.8)$$

8.2 q-Distribuições emergentes da mecânica estatística não-extensiva

Vamos tratar aqui dois caminhos para a caracterização de distribuições:

- (i) Através de métodos variacionais;
- (ii) Através da equação diferencial que a distribuição obedece.

Tomemos o primeiro caminho (veja, p. ex., Ref. [1]). A distribuição é obtida através da maximização de uma entropia, submetida às restrições de normalizabilidade e finitude de algum momento de ordem γ :

$$\langle p(x) \rangle = \int p(x) dx = 1, \quad (8.9)$$

$$\langle |x|^\gamma \rangle = \int |x|^\gamma p(x) dx < \infty. \quad (8.10)$$

Os casos usuais são $\gamma = 1$ e $\gamma = 2$, mas colocamos um valor genérico real qualquer. Neste caso, o módulo é necessário para evitar problemas quando $x < 0$. Consideremos a entropia de Boltzmann-Gibbs,

$$S_1 = -k_B \int p(x) \ln p(x) dx. \quad (8.11)$$

O método variacional origina formas exponenciais,

$$p(x) \propto \exp(-\beta|x|^\gamma), \quad (8.12)$$

sendo β o multiplicador de Lagrange. $\gamma = 1$ origina as funções exponenciais usuais, $\gamma = 2$ origina as Gaussianas. Para valores de γ arbitrários, temos as exponenciais esticadas.

Se considerarmos a entropia não-extensiva,

$$S_q = k \frac{1 - \int [p(x)]^q dx}{q - 1} \quad (k \in \mathbb{R}), \quad (8.13)$$

submetida a mesma condição de normalizabilidade, Eq. (8.9), juntamente com uma versão generalizada da condição de finitude de momento de ordem γ (vide [43, 44]),

$$\langle |x|^\gamma \rangle = \int |x|^\gamma [p(x)]^q dx < \infty, \quad (8.14)$$

surtem q -exponenciais esticadas,

$$p(x) \propto \exp_q(-\beta_q |x|^\gamma). \quad (8.15)$$

Vamos considerar aqui apenas $q \geq 1$, pois estamos interessados em funções (distribuições) que decaiam com x sem corte. O caso particular $q = 1$ recupera as exponenciais esticadas usuais ($\gamma = 1$ recupera a função exponencial, com $\beta_q = \beta$). $q = 2$ e $\gamma = 2$ corresponde à distribuição Lorentziana. Quando temos valores arbitrários de $q \neq 1$ e γ , temos as q -exponenciais esticadas. $\gamma = 1$ recupera a própria q -exponencial, $\gamma = 2$ origina o que podemos denominar distribuições q -Gaussianas. Este caminho foi inicialmente seguido por [43, 44]. É importante notar que a Equação (8.15), com $\gamma = 1$, é a própria lei de Zipf-Mandelbrot, Equação (8.8), bastando fazer uma mudança de variáveis [205].

Atentemos para outro detalhe importante: do mesmo modo que uma densidade de probabilidades exponencial ($\gamma = 1$) está associada a uma distribuição acumulada de probabilidades também exponencial, se tivermos uma densidade de probabilidades q -exponencial, sua distribuição acumulada correspondente também é uma q -exponencial. Sendo mais específicos, se uma variável positivo-definida ($0 \leq x \leq \infty$) tem densidade de probabilidade dada por

$$p(x) = (2 - q)\beta_q \exp_q(-\beta_q x) \quad (8.16)$$

(de modo que $\int_0^\infty p(x) dx = 1$), de acordo com a Equação (2.34), sua probabilidade acumulada inversa fica dada por

$$\begin{aligned} P(\geq x) &= \int_x^\infty p(y) dy \\ &= [\exp_q(-\beta_q x)]^{2-q}. \end{aligned} \quad (8.17)$$

Com as mudanças de variáveis $(2 - q)/(1 - q) = 1/(1 - q')$, i.e.,

$$q' = \frac{1}{2 - q} \quad (8.18)$$

e

$$\beta_{q'} = (2 - q) \beta_q, \quad (8.19)$$

temos

$$P(\geq x) = \exp_{q'}(-\beta_{q'} x), \quad (8.20)$$

que é também uma q -exponencial.

Caracterizemos agora a distribuição de probabilidades através da equação diferencial que ela é solução (caminho (ii)). Dentro do âmbito da mecânica estatística não-extensiva, este caminho foi desenvolvido inicialmente na Ref. [189], mas foi formulado bastante antes, nos célebres e seminais artigos de Planck sobre radiação do corpo negro [206], que representam o nascimento da mecânica quântica! (Vide também [24] para um recente artigo de revisão da mecânica estatística não-extensiva, com especial atenção a este caminho (ii), e também comentários esclarecedores sobre a relação das idéias de Planck com estes sistemas não-extensivos.) Vejamos: distribuições exponenciais esticadas obedecem à seguinte equação:

$$\frac{1}{\gamma x^{\gamma-1}} \frac{dp}{dx} = -\beta p. \quad (8.21)$$

Uma maneira bastante simples de generalizar esta Equação é

$$\frac{1}{\gamma x^{\gamma-1}} \frac{dp}{dx} = -\beta_q p^q \quad (q \geq 1), \quad (8.22)$$

cuja solução é $p(x) \propto \exp_q(-\beta_q x^\gamma)$ (Equação (8.15)).

Nada nos impele a pararmos por aqui. Seguindo então a mesma linha de raciocínio, de generalizar a equação diferencial, um possível e simples passo seguinte, que contenha as Eq.s (8.21) e (8.22) como casos particulares é buscar uma distribuição que obedeça

$$\frac{1}{\gamma x^{\gamma-1}} \frac{dp}{dx} = -(\beta_q - \beta_1) p^q - \beta_1 p \quad (q \geq 1, 0 \leq \beta_1 \ll \beta_q). \quad (8.23)$$

Esta é uma forma da Equação de Bernoulli, Equação (2.3) com $p(x) = \beta_1$ e $g(x) = -(\beta_q - \beta_1)$. Utilizando a condição de contorno $y(0) = 1$, temos a solução (vide Equação (2.5))

$$p(x) = \left[1 - \frac{\beta_q}{\beta_1} + \frac{\beta_q}{\beta_1} e^{(q-1)\beta_1 x^\gamma} \right]^{\frac{1}{1-q}}, \quad (8.24)$$

que podemos adequadamente denominá-la $(q,1)$ -exponencial esticada. É imediato verificar que $q = 1$, ou $\beta_q = 0$, a reduz ao caso usual das exponenciais esticadas (Equações (8.12) e (8.21)). Esta é exatamente (a menos de uma degenerescência de estados) a equação utilizada por Planck em seu primeiro artigo, de outubro de 1900 [206] (com $q = 2$ e $\gamma = 1$)². Esta distribuição apresenta três regimes distintos, separados pelos valores de transição x_q^* e x_1^{**} :

$$x_q^{*\gamma} \equiv \frac{1}{(q-1)\beta_q}, \quad (8.25)$$

$$x_1^{**\gamma} \equiv \frac{1}{(q-1)\beta_1}. \quad (8.26)$$

²É interessante também mencionar que Planck adotou esta equação como um procedimento de ajuste de curvas (*fitting*), além, certamente, de uma grande dose de intuição física! Em suas palavras [206], "one gets a radiation formula with two constants ... which, as far as I can see at the moment, fits the observational data, published up to now, as satisfactorily as the best equations put forward for the spectrum ...".

Os regimes são

$$p(x) \sim 1 - \beta_q x^\gamma \quad (\text{para } 0 < x \ll x_q^*), \quad (8.27)$$

que é equivalente a $q = 0$,

$$p(x) \sim [(q - 1)\beta_q x^\gamma]^{1/(1-q)} \quad (\text{para } x_q^* \ll x \ll x_1^{**}), \quad (8.28)$$

que é o regime intermediário de lei de potência, e finalmente

$$p(x) \sim \left(\frac{\beta_q}{\beta_1}\right)^{\frac{1}{1-q}} e^{-\beta_1 x^\gamma} \quad (\text{para } x \gg x_1^{**}), \quad (8.29)$$

que é a cauda exponencial, equivalente a $q = 1$. Quanto mais distantes os valores de β_1 e β_q ($\beta_1 \ll \beta_q$), mais pronunciadas são as transições entre os regimes, e fica mais evidenciado o regime intermediário, de lei de potência.

Podemos prosseguir, generalizando ainda mais a Equação (8.23) da maneira mais simples e imediata possível:

$$\frac{1}{\gamma x^{\gamma-1}} \frac{dp}{dx} = -(\beta_q - \beta_{q'}) p^q - \beta_{q'} p^{q'} \quad (1 \leq q' \leq q, 0 \leq \beta_{q'} \ll \beta_q). \quad (8.30)$$

Sua solução analítica foi apresentada em [189] (como a maior parte do material do item (ii) desta Seção), e é dada pela seguinte função inversa:

$$x^\gamma = \frac{1}{\beta_{q'}} \left\{ \frac{p^{-(q'-1)} - 1}{q' - 1} - \frac{(\beta_q/\beta_{q'}) - 1}{1 + q - 2q'} \right. \\ \left. \times [H(1; q - 2q', q - q', (\beta_q/\beta_{q'}) - 1) - H(p; q - 2q', q - q', (\beta_q/\beta_{q'}) - 1)] \right\}, \quad (8.31)$$

sendo

$$H(p; a, b, c) = p^{1+a} F\left(\frac{1+a}{b}, 1; \frac{1+a+b}{c}; -p^b c\right), \quad (8.32)$$

e F a função hipergeométrica. Esta distribuição (a inversa de (8.31)) consistentemente merece ser denominada (q, q') -exponencial esticada, e é uma generalização de todos os

casos anteriores. É uma espécie de superposição entre duas q -exponenciais, com valores distintos do índice entrópico q .

De modo análogo ao caso anterior (com transição para uma cauda exponencial), esta distribuição também apresenta três regimes, marcados pelas transições x_q^* (Equação (8.25)), e $x_{q'}^{**}$:

$$x_{q'}^{**\gamma} = \frac{[(q-1)\beta_q]^{\frac{q'-1}{q-q'}}}{[(q'-1)\beta_{q'}]^{\frac{q-1}{q-q'}}}. \quad (8.33)$$

São eles o regime inicial linear (em x^γ):

$$p(x) \sim 1 - \beta_q x^\gamma \quad (\text{para } 0 < x \ll x_q^*), \quad (8.34)$$

o regime intermediário de lei de potência, com inclinação (no gráfico em escala log-log) dada por $\gamma/(1-q)$:

$$p(x) \sim [(q-1)\beta_q x^\gamma]^{1/(1-q)} \quad (\text{para } x_q^* \ll x \ll x_{q'}^{**}) \quad (8.35)$$

(esses dois regimes são os mesmos do caso anterior, Equações (8.27) e (8.28)), e finalmente a cauda, também lei de potência:

$$p(x) \sim [(q'-1)\beta_{q'} x^\gamma]^{1/(1-q')} \quad (\text{para } x \gg x_{q'}^{**}), \quad (8.36)$$

com inclinação no referido gráfico log-log dada por $\gamma/(1-q')$. A interseção das retas dos regimes intermediário e cauda, (com inclinações $\gamma/(1-q)$ e $\gamma/(1-q')$), determina $x_{q'}^{**}$ (Equação (8.33)). Notemos que $\beta_{q'} = 0$, ou $\beta_{q'} = \beta_q$, ou ainda $q' = q$, recuperam a equação diferencial obedecida pelas q -exponenciais esticadas, (8.22), com $x_{q'}^{**} \rightarrow \infty$. Naturalmente a Equação (8.33) se reduz à Equação (8.26) quando $q' = 1$. Algumas vezes a transição $x_{q'}^{**}$ é denominada joelho (*knee*), particularmente no âmbito de sistemas de altas energias e raios cósmicos (vide [207]).

Salientamos que é mais conveniente, do ponto de vista numérico, avaliar a distribuição (q, q') -exponencial esticada pela integração de sua equação diferencial (8.30), do que

através da sua solução analítica, Equação (8.31). Sendo esta distribuição a forma *acumulada inversa* (na Seção 8.1 a denominamos por $P(\geq x)$), a integração fica dada por

$$x^\gamma = \int_P^1 \frac{dx}{\beta_{q'} x^{q'} + (\beta_q - \beta_{q'}) x^q}. \quad (8.37)$$

Resumindo, seguindo o caminho (ii), chegamos a quatro distribuições de probabilidade, sempre a seguinte generalizando a anterior, a saber, as Equações (8.12), (8.15), (8.24) e (8.31). A Figura 8.2 compara estas quatro equações, numa faixa ampla de variação tanto na abscissa quanto na ordenada. O gráfico log-log torna visível a cauda exponencial (por um decaimento abrupto), nos casos da exponencial usual Eq. (8.12) e da $(q,1)$ -exponencial (com transição para cauda exponencial, Eq. (8.24)). Também evidencia (especialmente quando $\beta_{q'} \ll \beta_q$) dois regimes em lei de potência para a (q, q') -exponencial Eq. (8.31).

Comparamos a distribuição exponencial esticada, Equação (8.6), com a q -exponencial, Equação (8.15) com $\gamma = 1$, na Figura 8.3 (vide [39]). Na Figura (a) os pontos foram gerados com uma exponencial esticada e ajustados com uma q -exponencial. Na Figura (b) procedemos ao contrário, os pontos obtidos com uma q -exponencial foram ajustados com uma exponencial esticada. O objetivo destas Figuras 8.3(a) e (b) é evidenciar que é indiscernível qual a melhor distribuição entre essas duas, quando a faixa de variação em x é pequena, caso muito freqüente em vários exemplos de sistemas, por ausência de dados. Quando a faixa de variação em x se estende a muitas décadas, o comportamento assintótico da exponencial esticada difere bastante da q -exponencial (cauda exponencial versus cauda em lei de potência) e então é possível discernir qual a mais adequada (Fig. 8.3(c)). Isto significa que *apenas* o ajuste dos dados experimentais muitas vezes não é decisivo a respeito de qual distribuição um dado sistema obedece. É apenas um indicativo; somado a vários outros elementos (epistemológicos e/ou experimentais), aumentamos o grau de certeza na decisão de qual seja a distribuição “correta” para um dado fenômeno.

Não conhecemos o caminho variacional (i) para obtenção das duas últimas, e mais gerais, distribuições (8.24) e (8.31). Para obtê-lo, precisaríamos de uma forma entrópica mais geral que a entropia não-extensiva S_q . Esta entropia possivelmente está relacionada à super-estatística de Beck-Cohen [208] (vide também a Ref. [24]). A denominação, segundo os autores, é por se tratar de uma “estatística de estatísticas”.

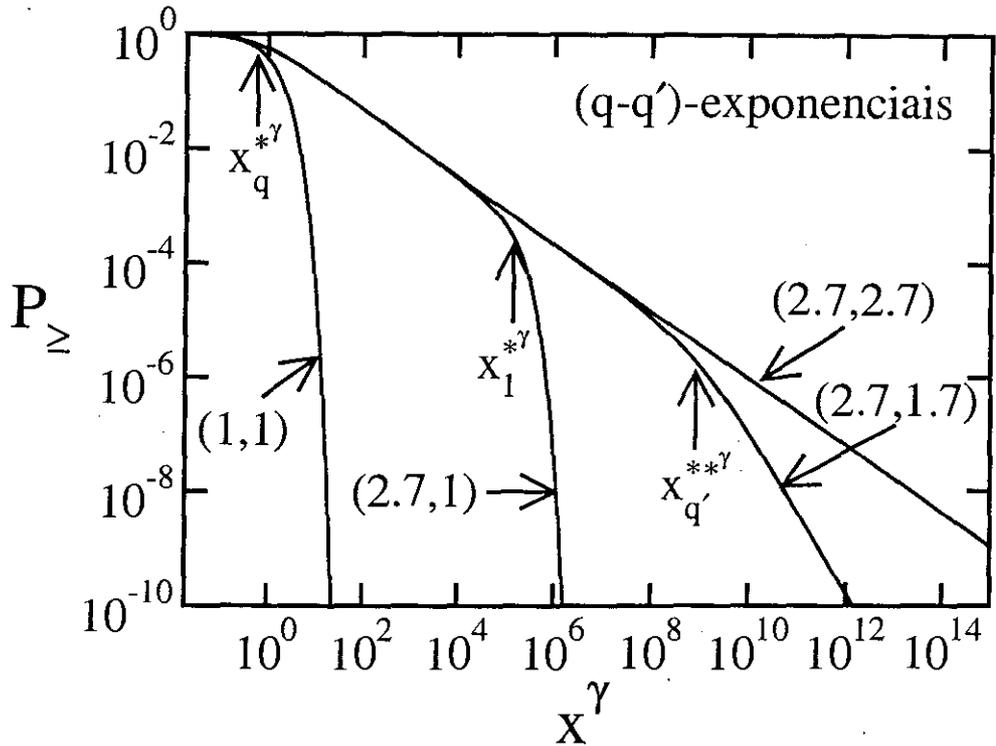


Figura 8.2: Comparação entre q -distribuições exponenciais esticadas. Parâmetros: $\beta_q = 1$, $\beta_{q'} = 10^{-5}$. q e q' assumem valores de 2.7, 1.7 ou 1.0, indicados em cada caso. Curvas (1,1): exponencial usual, Eq. (8.12); (2.7,1): q -exponencial com transição para cauda exponencial, Eq. (8.24); (2.7,1.7): (q, q') -exponencial, Eq. (8.31); (2.7,2.7): q -exponencial simples, Eq. (8.15). Valores de transição $x_q^{*\gamma}$, $x_1^{*\gamma}$ e $x_{q'}^{**\gamma}$ são indicados. (Figura similar à contida em [189].)

As distribuições que apresentamos até aqui são monótonas decrescentes. É freqüente distribuições (na forma de densidade de probabilidades) apresentarem $p(0) = 0$ e um ponto de máximo, em conseqüência de uma degenerescência de estados. Uma curva típica desse tipo, dentro do formalismo não-extensivo, tem a forma

$$p(x) \propto x^{\delta} \exp_q(-\beta_q x), \tag{8.38}$$

sendo δ um parâmetro relacionado com a dimensão do espaço. Esta curva apresenta um ponto de máximo em

$$x_{max} = \frac{\delta}{1 - (q - 1)\delta}, \tag{8.39}$$

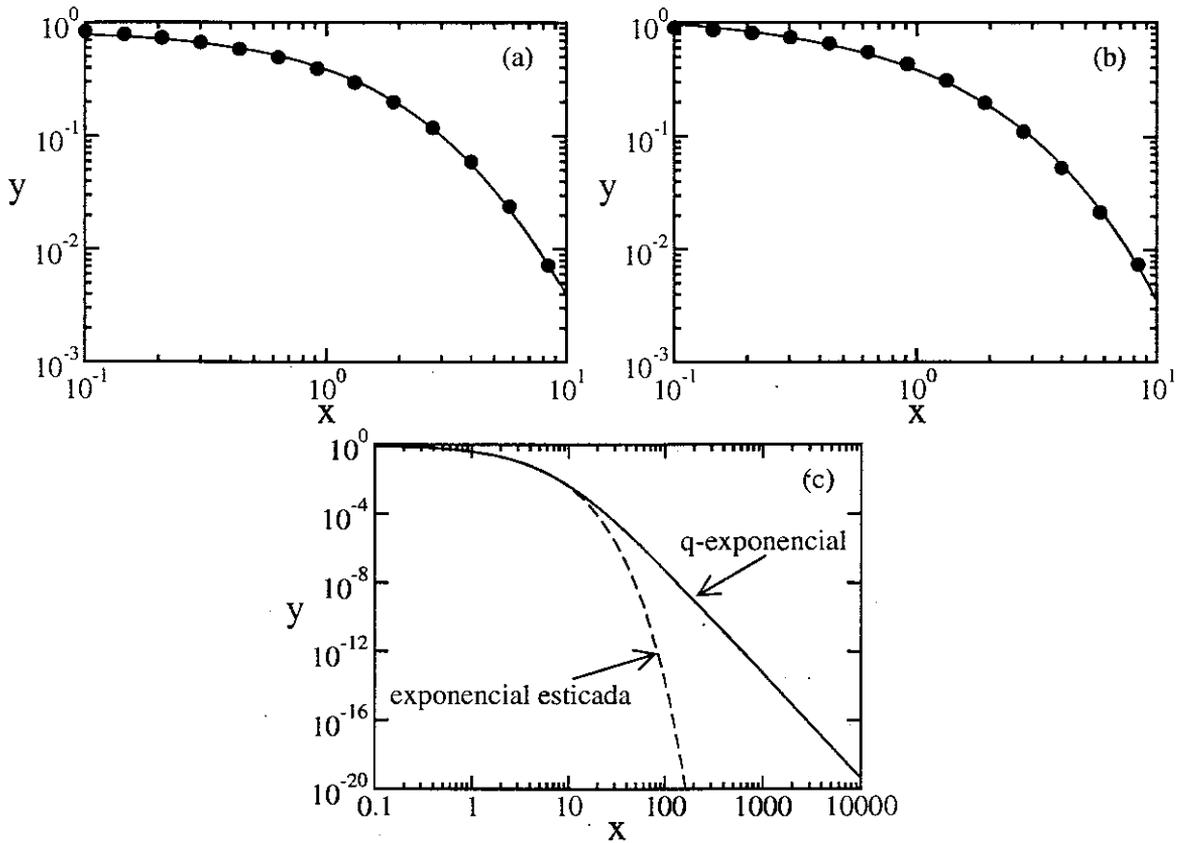


Figura 8.3: Comparação entre a distribuição exponencial esticada e a q -exponencial. (a) pontos obtidos pela exponencial esticada $y_s = e^{-x^{3/4}}$ e ajustados por $y_q = A/[1 + (q - 1)\beta_q x]^{1/(q-1)}$, com $A = 0.8544$, $\beta_q = 0.8520$ e $q = 1.1627$; (b) pontos obtidos pela q -exponencial $y_q = 1/[1 + 0.2x]^5$ e ajustados por $y_s = B e^{-\delta x^c}$, com $B = 1.2243$, $\delta = 1.1638$ e $c = 0.70196$; (c) exponencial esticada (linha tracejada) e q -exponencial (linha sólida) com parâmetros da Fig. (a), com maior variação em x . Para pequenas variações em x , não é possível discernir qual a curva que se ajusta melhor aos pontos. Para grandes variações em x , as caudas das curvas se separam drasticamente. (Figuras (a) e (b) apareceram originalmente em [39], aqui refeitas.)

desde que

$$(q - 1)\delta < 1. \quad (8.40)$$

No limite $q \rightarrow 1$, $\delta < \infty$. O comportamento assintótico é uma lei de potência $\propto 1/x^{1/(q-1)-\delta}$. A Figura 8.4 ilustra um caso típico. Naturalmente é possível ter distribuições com densidades de estado para os casos mais gerais, (q, q') -exponenciais esticadas, Equações (8.24) e (8.31), por uma generalização imediata da Equação (8.38).

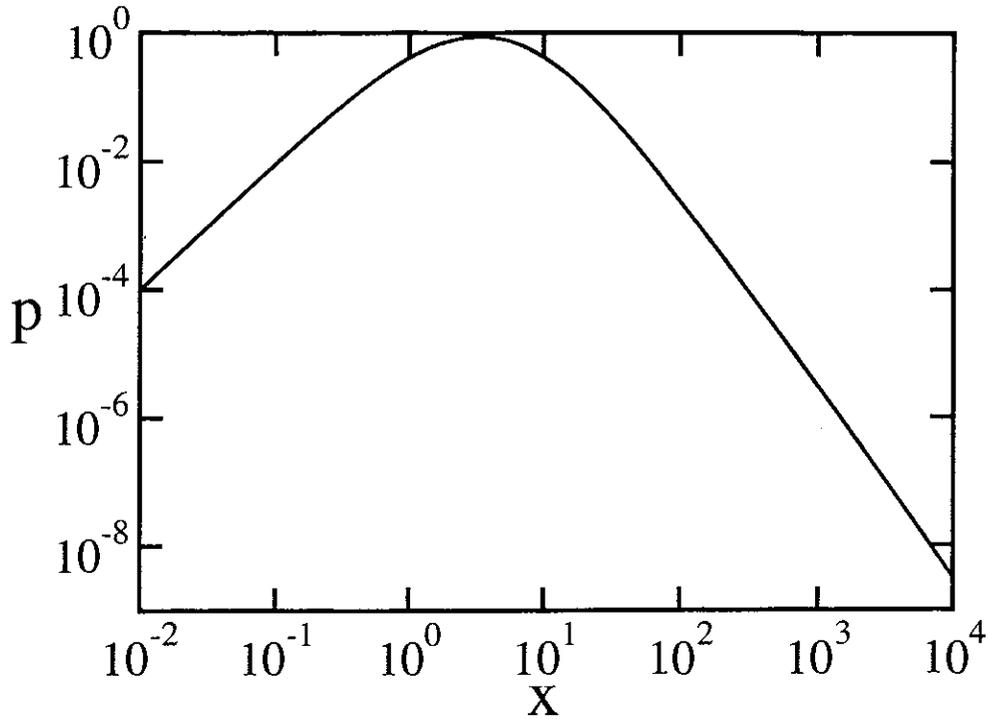


Figura 8.4: q -exponencial com densidade de estados. $p(x) = A \frac{x^\delta}{[1+(q+1)\beta_q x]^{1/(q-1)}}$, com $A = 1$, $\delta = 2$, $\beta_q = 1$ e $q = 1.2$.

Finalmente, as distribuições que temos apresentado são para variáveis independentes x contínuas. Muitas aplicações têm variáveis discretas. Quando o número de “eventos” é elevado, a aproximação contínua é razoável, mas quando temos poucos eventos, é necessário levar isto em conta. Para uma variável x não-negativa discreta, a normalização da distribuição inversa de probabilidades acumulada deve ser

$$P(\geq 1) = 1, \quad (8.41)$$

em vez da normalização usual do caso contínuo, $P(\geq 0) = 1$. Para evitar confusões, vamos denominar as distribuições normalizadas em $x = 0$ por $P^{(0)}$ (as que escrevemos até o momento), e as que obedecem a normalização em $x = 1$, $P^{(1)}$. Respectivamente alteramos a nomenclatura dos parâmetros para $\beta_q^{(0)}$ e $\beta_q^{(1)}$. Estes dois tipos de normalização estão relacionados entre si por

$$P^{(1)}(\geq x) = \frac{1}{P^{(0)}(1)} P^{(0)}(\geq x) \quad (x \geq 1). \quad (8.42)$$

Se substituirmos esta mudança de variáveis na equação diferencial geral, Eq. (8.30), originalmente válida para $P^{(0)}(\geq x)$, chegamos a uma equação similar, apenas com as redefinições das variáveis

$$\beta_q^{(1)} = \frac{\beta_q^{(0)}}{[P^{(0)}(1)]^{1-q}} \quad (8.43)$$

e

$$\beta_{q'}^{(1)} = \frac{\beta_{q'}^{(0)}}{[P^{(0)}(1)]^{1-q'}}. \quad (8.44)$$

Verificamos imediatamente que, na distribuição exponencial usual ($q = q' = 1$), $\beta^{(1)} = \beta^{(0)}$. Os parâmetros β_q para a q -distribuição estão relacionados por (vide similar em [34, Eq. (40)])

$$\beta_q^{(1)} = \frac{\beta_q^{(0)}}{1 + (1 - q)\beta_q^{(0)}}. \quad (8.45)$$

A distribuição $(q,1)$ -exponencial tem seus parâmetros relacionados por

$$\beta_q^{(1)} = \frac{\beta_q^{(0)}}{1 - \frac{\beta_q^{(0)}}{\beta_1^{(0)}} + \frac{\beta_q^{(0)}}{\beta_1^{(0)}} e^{(q-1)\beta_1^{(0)}}}. \quad (8.46)$$

É imediato verificar que $\beta_q^{(0)}/\beta_1^{(0)} = \beta_q^{(1)}/\beta_1^{(1)}$. Não dispomos das relações entre $\beta_q^{(0)}$, $\beta_{q'}^{(0)}$, $\beta_q^{(1)}$, $\beta_{q'}^{(1)}$ para a distribuição (q, q') -exponencial, mas o essencial é que os parâmetros q e q' permanecem os mesmos.

Outra maneira equivalente para procedermos a normalização dada pela Eq. (8.41) (para os casos exponencial, q -exponencial e $(q,1)$ -exponencial) consiste em substituir diretamente a condição de contorno (Eq. (8.41)) na solução da Equação de Bernoulli, Eq. (2.5). Obtemos uma simples translação:

$$x^{\gamma'} = x^{\gamma} - 1, \quad (8.47)$$

ou seja, para a exponencial temos

$$P^{(1)}(\geq x) = \exp[-\beta(x^{\gamma} - 1)], \quad (8.48)$$

para a q -exponencial,

$$P^{(1)}(\geq x) = \exp_q[-\beta_q^{(1)}(x^\gamma - 1)], \quad (8.49)$$

e para a $(q,1)$ -exponencial,

$$P^{(1)}(\geq x) = \left[1 - \frac{\beta_q^{(1)}}{\beta_1^{(1)}} + \frac{\beta_q^{(1)}}{\beta_1^{(1)}} e^{(q-1)\beta_1^{(1)}(x^\gamma-1)} \right]^{\frac{1}{1-q}}. \quad (8.50)$$

Para o caso da (q,q') -exponencial, não temos a demonstração mas é de se esperar que seja válida a mesma Equação (8.31), com a transformação dada pela Equação (8.47).

Nas Seções 8.3 e 8.4 seguintes, apresentamos alguns exemplos de sistemas que são relativamente bem ajustados com q -exponenciais, ou equações pertencentes a sua família (que apresentamos na presente Seção). Precisamos ter em mente, especialmente naqueles casos em que a faixa de variação é pequena, que o conjunto de exemplos não constitui uma prova, mas uma coleção de evidências.

8.3 Sistemas físicos

8.3.1 Terremotos

Consideremos um dos mais paradigmáticos exemplos de distribuição em lei de potência, que é a dos terremotos. Terremotos são fenômenos que seguramente podem estar classificados na categoria de *sistemas complexos*. Exibem correlações espaço-temporais de longo alcance, fractalidade, criticalidade auto-organizada etc. [209, 210]. Consideremos a escala Richter, que mede o grau, ou magnitude, de um terremoto em função da máxima amplitude de deslocamento de terra S :

$$m = \log_{10} S. \quad (8.51)$$

Um deslocamento de $S = 1$ mm corresponde a $m = 2$. A amplitude máxima de deslocamento de terra é linearmente relacionada com a energia ε liberada pelo terremoto, $m = \log_{32} \varepsilon$ (vide, p. ex. [211, 212]).

De acordo com a lei de Gutenberg-Richter ([202], citado por [209, 210]), o número de terremotos em um ano, $N(> m)$, em uma dada região, com magnitude maior que m obedece a uma lei de potência em função da energia desprendida, que pode ser escrita como

$$\log N(> m) \propto -bm, \quad (8.52)$$

onde $b \approx 1$. Em recente artigo, Per Bak e colaboradores [210] (vide também [213, 209, 214]) analisaram um número razoavelmente grande de terremotos em uma região específica da Califórnia (20°N – 45°N de latitude e 100°W – 125°W de longitude), durante um período de 17 anos (1984 a 2000), totalizando 335 076 eventos. Esta região inclui as cidades de São Francisco, Los Angeles, São Diego, e boa parte do norte do México (a Cidade do México não está incluída, mas fica próxima do vértice inferior direito, quando olhamos o mapa no sentido tradicional, com o Norte para cima.). Para a região e período analisados, foi encontrado [210] $b = 0.95$, para $m > 2$. Tremores com $m \leq 2$ foram desprezados naquela análise, segundo os autores, por dificuldades na detecção. O ponto principal do trabalho foi a identificação de uma lei de escala que unifica as leis de Gutenberg-Richter, de Omori, bastante anterior [215] (citado por [210]) que estabelece um decaimento temporal em lei de potência para os terremotos secundários, após um terremoto principal, e a dimensão fractal da falha de San Andreas ($d_f \approx 1.2$). Mas não é este aspecto que vamos abordar aqui. Vamos analisar apenas a distribuição de terremotos ali publicada.

Não vamos entrar no mérito da discussão de aspectos técnicos da detecção de tremores. Simplesmente capturamos os dados da Fig. 1 de [210] e os ajustamos a uma q -exponencial:

$$N(> S) = \frac{A}{[1 + (q - 1)\beta_q S]^{1/(q-1)}}. \quad (8.53)$$

O parâmetro A é apenas um termo de normalização, dado pelo número médio de terremotos por ano,

$$A = \frac{335\,076}{17}.$$

Encontramos o melhor ajuste com $q = 2$, correspondente a $b = 1$ (a própria lei de Pareto, valor também reportado em [209]) e $\beta_q = 0.032$ (correspondente a uma magnitude típica

$m = \log_{10}(1/\beta_q) = 1.5$). A Figura 8.5 apresenta os resultados, evidenciando que a q -exponencial se ajusta razoavelmente bem a toda a faixa de dados, incluindo os tremores muito fracos³.

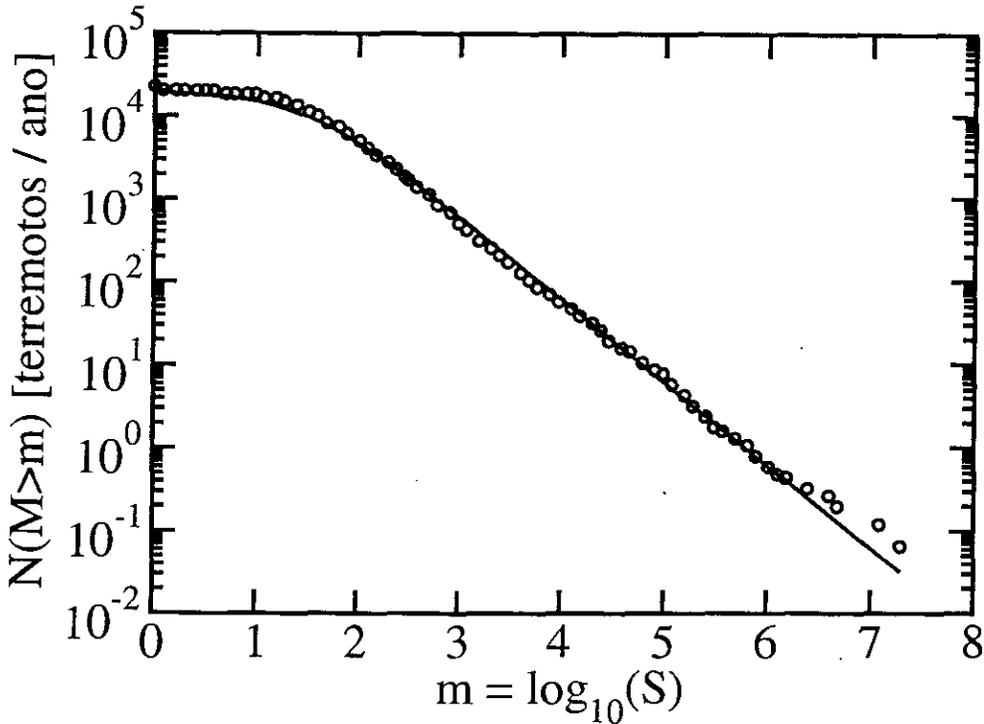


Figura 8.5: Distribuição de terremotos na Califórnia ajustados por uma q -exponencial.

É curioso observar que, naquela região da Califórnia, é provável a ocorrência de 1 terremoto de grau 7 a cada 10 anos, 1 terremoto de grau próximo a 6 a cada ano, 1 de grau entre 4 e 5 a cada mês e 1 de grau próximo a 3 por dia!

Outros trabalhos têm aparecido na literatura, relacionando terremotos com a mecânica estatística não-extensiva. Sumiyoshi Abe e colaboradores, p. ex., têm analisado distribuições espaciais [217] e distribuições temporais (lei de Omori) [218, 219], também encontrando distribuições q -exponenciais em ambos os casos. Curiosamente nas distribuições espaciais, valores do parâmetro entrópico tem sido da ordem de $q_s \approx 0.75$, portanto valores menores que a unidade. Já nas distribuições temporais, $q_t \approx 1.2 \sim 1.3$.

³Este ajuste (apenas os parâmetros, não a Figura 8.5) foi indicado em [216]. Nesta Referência houve um erro de impressão: foi publicado $\beta_q = 0.32$, em vez do valor correto, 0.032.

Aqui também tem um caso de dualidade de abordagens, como os referidos no Capítulo 6. Os autores conjecturam que $q_s + q_t \sim 2$, embora estudos adicionais sejam necessários para verificação desta possível relação. Os mesmos autores também têm descoberto estruturas do tipo mundo-pequeno (*small-world*) em terremotos [220].

8.3.2 Material granular

É bem sabido que materiais granulares exibem comportamentos complexos (vide, p. ex., [2]). Vamos analisar um experimento realizado na *Université Pierre et Marie Curie*, em Paris, descrito nas Ref. [221, 222]. Os autores montaram um equipamento para medir flutuações na força exercida por pequenas esferas (1.5 mm) sobre as paredes laterais de um recipiente retangular em 2-D (a largura do recipiente é pouco maior que o diâmetro das esferas) com fundo móvel. Foram utilizadas esferas de aço e de alumínio (separadamente), para avaliar o efeito do atrito (menor com o aço). Inicialmente as esferas são colocadas num retículo triangular, que é a configuração de máxima compactação (mínima energia) em 2-D. Em seguida, o pistão do fundo é levantado a uma velocidade constante (os experimentos variam de 0.05 a 50 $\mu\text{m/s}$). O rolamento das esferas provoca o re-arranjo no retículo. A força vertical transmitida pelo pistão é transformada em força horizontal, que finalmente vai ser exercida contra as paredes laterais, onde vai ser medida. Se não houvesse atrito algum entre as esferas (rolagem perfeita), o sistema se moveria para cima mantendo a estrutura reticular triangular inicial. Com atrito, o arranjo triangular vai sendo destruído e a força horizontal sobre as paredes apresenta flutuações. Este desarranjo provoca o surgimento de “caminhos preferenciais” (i.e., o caminho que a força aplicada sob o fundo do recipiente faz para chegar até as paredes laterais) formando estruturas em arco. É assim visível uma transição entre um sistema inicialmente ordenado para um sistema desordenado e com isso a emergência de comportamentos coletivos, uma das assinaturas dos sistemas complexos. Os autores realizam uma série de análises; vamos nos deter especificamente na Figura 8 de [221], onde é apresentada a densidade de probabilidades em função das variações de energia (consequência das flutuações da força exercida sobre as paredes laterais), para experimentos com esferas de alumínio submetidas

a diferentes velocidades de ascensão. Os autores identificaram duas inclinações diferentes (em escala log-log): uma para eventos mais prováveis (menor ΔE) e outra para eventos mais raros (maior ΔE). Eles consideram, entretanto, que este comportamento diferenciado em maiores energias é consequência do pequeno número de eventos nesta região, originando uma estatística pobre. Utilizamos os dados⁴ e ajustamos a função

$$p(\Delta E) = A \frac{(\Delta E)^\delta}{[1 + (q + 1)\beta_q \Delta E]^{\frac{1}{q-1}}}, \quad (8.54)$$

onde $p(\Delta E)$ é a densidade de probabilidade associada à flutuação de energia ΔE . O parâmetro A é um termo de normalização e tem um papel secundário no problema. O fator $(\Delta E)^\delta$ corresponde a uma densidade de estados, associado a uma possível degenerescência. Temos, pois, quatro parâmetros (A , δ , β_q e q) sendo que um deles (A) é irrelevante. Nossa Figura 8.6 apresenta os dados experimentais obtidos em [221], juntamente com a Equação (8.54), ilustrando que esta função descreve razoavelmente bem toda a faixa dos dados experimentais.

⁴Somos gratos a Evelyne Kolb, que gentilmente nos cedeu os dados experimentais.

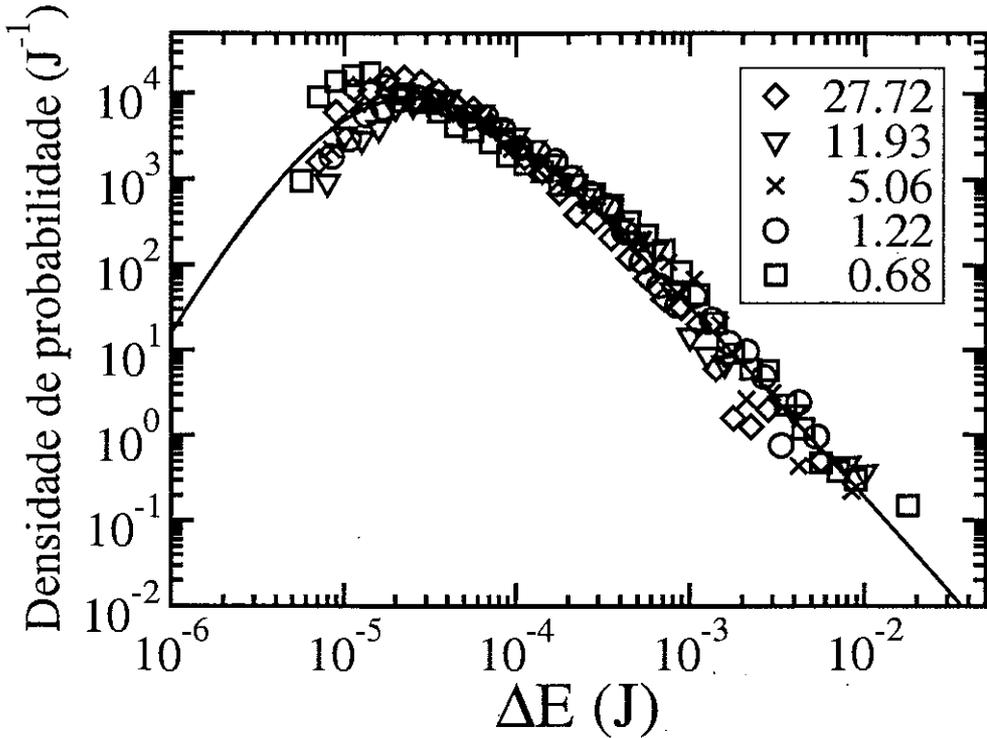


Figura 8.6: Material granular com deslocamento vertical ascendente constante. Esferas de alumínio com diferentes velocidades (em $\mu m/s$) são indicadas na legenda. Equação (8.54) (linha cheia) com parâmetros: $A = 7.41286 \times 10^{22}$, $1/\beta_q = 2.663 \times 10^{-6} J$, $\delta = 3.58557$, $q = 1.17094$.

8.3.3 Rede topológica em um aglomerado de Lennard-Jones

Recentemente foi analisada a topologia da energia potencial de um aglomerado de Lennard-Jones [223], sendo identificada uma estrutura em rede do tipo mundo-pequeno (*small-world*). O autor enfatiza a novidade de observar esta estrutura em rede a partir de uma característica estática, que é a topologia da energia potencial — outros autores associam o aparecimento da estrutura mundo-pequeno a características dinâmicas [224, 225].

A topologia da energia potencial é uma superfície multidimensional representando a dependência da energia potencial com as posições dos átomos do sistema. Essa hiper-superfície apresenta um padrão bastante complexo, análogo a montanhas, vales e passagens em duas dimensões. O autor [223] localiza os mínimos de potencial (os vales) delimitados por fronteiras. Em baixas temperaturas, os átomos passam a maior parte do

tempo vibrando em alguns desses vales, eventualmente saltando para outro vale vizinho através das passagens nas suas fronteiras (denominados estados de transição). Essa estrutura é mapeada em um grafo, tendo os pontos de mínimo como os nós e os pontos de passagem como as suas conexões. O número de mínimos e o número de transições cresce exponencialmente com o tamanho do sistema. Por isso, foram estudados pequenos aglomerados, de 9 a 14 átomos (com 14 átomos foram localizados 4 196 pontos de mínimo e 87 219 estados de transição).

O ponto que queremos abordar é a Fig. 3 de [223], onde são ilustradas as probabilidades acumuladas do número de nós que têm mais de k conexões, para cada sistema (de 9 a 14 átomos). Embora os sistemas analisados sejam pequenos, fica claro o surgimento de uma cauda em lei de potência a medida que o tamanho do sistema cresce. Também naquela Fig. 3, é analisada a probabilidade acumulada para os sistemas com 12, 13 e 14 átomos, tomados em conjunto, em função do número de conexões, normalizados por sua média, $k/\langle k \rangle$. As curvas se colapsam sugerindo um comportamento universal.

Nós analisamos os dados desta Figura⁵ à luz das q -distribuições não-extensivas. Os dados de probabilidade acumulada, Figura 8.7 (correspondente ao *inset* da Fig. 3 de [223]), para nós com mais de k conexões são razoavelmente bem ajustados a uma q -Gaussiana (Equação (8.15) com $\gamma = 2$):

$$P(> k) = \frac{1}{[1 + (q - 1)\beta_q (k/\langle k \rangle)^2]^{\frac{1}{q-1}}}, \quad (8.55)$$

com $q = 2$ e $1/\sqrt{\beta_q} = 0.6324$.

A Figura 8.8 apresenta ajustes para a distribuição acumulada para os vários sistemas analisados ($N = 9-14$) ($n(> k)$ é o número de nós com mais de k conexões, n_0 é o número total de nós). Ajustamos a q -Gaussiana com transição para cauda exponencial (Equação (8.24) com $\gamma = 2$) para cada curva (Fig. 8.8(a)):

$$n(> k) = \frac{n_0}{\left[1 - \frac{\beta_q}{\beta_1} + \frac{\beta_q}{\beta_1} e^{(q-1)\beta_1 k^2}\right]^{\frac{1}{q-1}}}. \quad (8.56)$$

⁵Os dados foram gentilmente cedidos por Jonathan P.K. Doye.

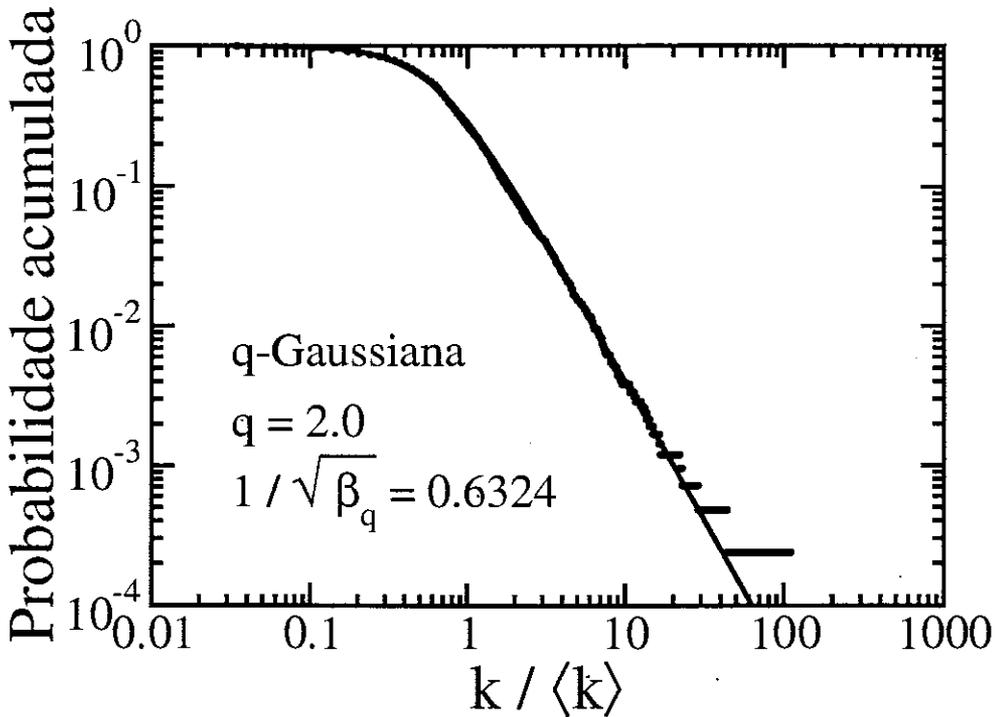


Figura 8.7: Probabilidade acumulada em aglomerados de Lennard-Jones, para número de nós com mais de k conexões, normalizados por $\langle k \rangle$. A curva colapsa dados dos aglomerados com 12, 13 e 14 átomos.

A Fig. 8.8(b), ilustra como crescem os parâmetros número total de mínimos n_0 , $1/\sqrt{\beta_q}$, $1/\sqrt{\beta_1}$ e $\langle k \rangle$. Verificamos o crescimento exponencial de n_0 , a estabilização de $1/\sqrt{\beta_q}$, também que

$$1/\sqrt{\beta_q} \approx \langle k \rangle, \quad (8.57)$$

e ainda que $\beta_1 \rightarrow 0$ com o aumento de N ($1/\sqrt{\beta_1}$ divergente). Este último resultado mostra que o regime em lei de potência fica cada vez mais pronunciado à medida que o sistema aumenta — a transição para uma cauda exponencial, Equação (8.56), é um efeito de tamanho finito.

A Tabela 8.1 apresenta os parâmetros utilizados na Equação (8.56).

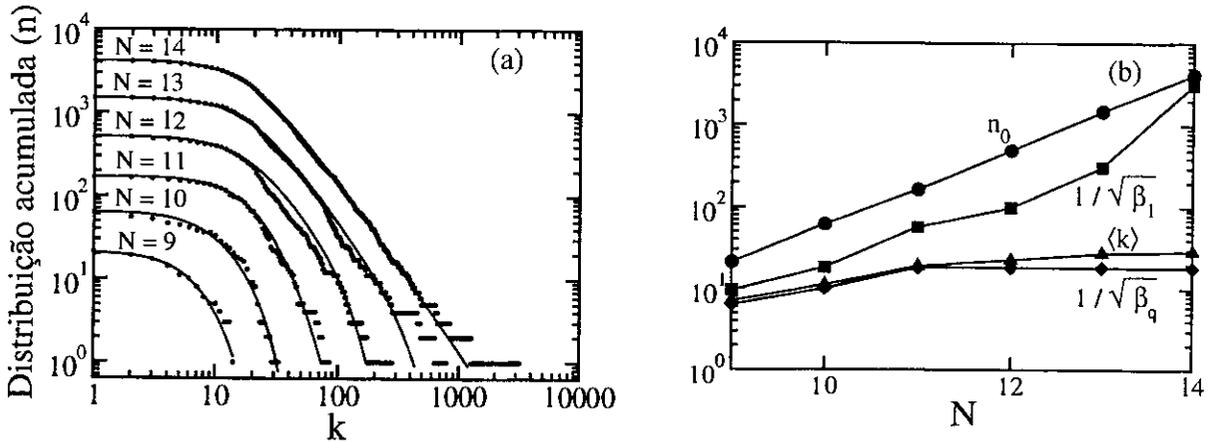


Figura 8.8: Distribuição acumulada em aglomerados de Lennard-Jones, para nós com mais de k conexões (número de átomos indicados). (a) Ajuste da Eq. (8.56); (b) comportamento dos parâmetros desta Equação com o tamanho do sistema. n_0 : círculos, $1/\sqrt{\beta_1}$: quadrados, $1/\sqrt{\beta_q}$: diamantes, $\langle k \rangle$: triângulos. Vemos que $\lim_{N \rightarrow \infty} \beta_1 \rightarrow 0$, confirmando que o regime de lei de potência é dominante no sistema macroscópico, conclusão também induzida pela Fig. (a).

Tabela 8.1: Parâmetros para distribuição acumulada em aglomerados de Lennard-Jones, utilizados na Equação (8.56). Inclui também $\langle k \rangle$, da Equação (8.55).

N	n_0	$\langle k \rangle$	q	β_q	β_1
9	21	7.05	2.0	2.5×10^{-2}	1.1×10^{-2}
10	64	11.22	2.0	1.0×10^{-2}	3.0×10^{-3}
11	170	19.09	1.5	3.0×10^{-3}	3.0×10^{-4}
12	515	22.73	2.0	3.0×10^{-3}	1.0×10^{-4}
13	1509	27.44	2.0	3.0×10^{-3}	1.0×10^{-5}
14	4196	29.12	2.0	3.0×10^{-3}	1.0×10^{-7}

8.3.4 Raios Cósmicos

Nesta Sub-seção analisamos a distribuição de raios cósmicos que chegam na Terra. Raios cósmicos consistem num problema muito interessante. Eles portam informações de processos intra- e extra-galácticos, e ainda informações cosmológicas relacionadas com processos provindos de fontes variadas, ocorridos em diferentes escalas temporais, incluindo os primeiros tempos de existência do Universo. Esta variedade de fontes, de tempos e de meios atravessados até chegarem na Terra (podendo estes meios terem alguma estrutura fractal) seguramente incluem os raios cósmicos na categoria de sistemas complexos. Para

uma abordagem mais geral sobre raios cósmicos, vide Ref.s [226, 227].

Para nós, brasileiros (e particularmente nós que temos um vínculo com o CBPF) os raios cósmicos têm um atrativo histórico-emocional adicional: dentre os primeiros trabalhos de César Lattes, que o projetaram internacionalmente, estão justamente aqueles relacionados a observações dos mésons-pi em raios cósmicos [228, 229, 230, 231]⁶.

Partículas subatômicas, tipicamente núcleos leves, caem constantemente na Terra. Suas energias são bastante variadas, abrangendo uma faixa de 13 décadas (de 10^8 a 10^{21} eV). Os fluxos, medidos na alta atmosfera terrestre (chamados de raios cósmicos primários), são ainda mais espalhados, chegando a 33 décadas (de 10^4 a 10^{-29} [m² sr s GeV]⁻¹). Estas faixas de variação estão entre as maiores experimentalmente conhecidas.

Raios cósmicos ainda não têm uma explicação completa e amplamente aceita. As teorias existentes são baseadas nos trabalhos pioneiros de Fermi [234] e Hagedorn [235]. É conhecido em raios cósmicos o fenômeno do denominado joelho (*knee*) [207] — a distribuição de fluxos apresenta dois regimes distintos, cada um deles seguindo uma lei de potência, com uma pequena, mas bem definida, transição entre eles (em energias pouco abaixo de 10^{16}). Esta característica faz as (q, q') -exponenciais caírem como uma luva nos dados. Já havíamos mencionado (vide Seção 8.2) que estas funções são uma espécie de superposição de duas q -exponenciais, com distintos valores de q , e a transição (joelho) fica dada pela Eq. (8.33). Outro fenômeno observado em raios cósmicos na região de altas energias (acima de 10^{19} eV) é conhecido com tornozelo (*ankle*). Nesta região, o regime em lei de potência é interrompido, talvez com um abrupto corte (*cut-off*). Os dados apresentam uma transição adicional, e a curva se inclina para cima. Este fenômeno é conhecido como GZK, iniciais dos autores que propuseram um modelo para descrevê-lo [236, 237]. Este regime após o tornozelo (que também ocorre, como veremos, em sistemas sociais, ali conhecido como *king effect* (efeito rei) (vide também Sub-seções 8.4.2, 8.4.5) não pode ser descrito pela presente abordagem. Trata-se possivelmente de um fenômeno de não-equilíbrio, ou então resultado de estatísticas pobres. Sua completa elucidação ainda está pendente e possivelmente necessitará de dados experimentais adicionais, provenientes do

⁶Para uma abordagem histórica dos trabalhos de César Lattes, vide Ref.s [232, 233].

Observatório Pierre Auger, ou outros projetos assemelhados.

Nosso trabalho [238, 239] não segue uma linha teórica. Consiste em dar um tratamento fenomenológico não-extensivo ao problema. Consideramos que a distribuição de densidade de probabilidades $p(E)$ é dada por uma (q, q') -exponencial, Eq. (8.30) e Eq. (8.31) (com $\gamma = 1$). Além disso, o momento \mathbf{p} de uma partícula relativística é dado por [240, 241]

$$\mathbf{p} = \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad (8.58)$$

e sua energia relativística,

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad (8.59)$$

sendo m sua massa de repouso, \mathbf{v} sua velocidade em relação a um sistema referencial inercial, $v = |\mathbf{v}|$ e, naturalmente, c a velocidade da luz no vácuo. Estas expressões podem ser combinadas na forma

$$\frac{E^2}{c^2} = |\mathbf{p}|^2 + m^2c^2. \quad (8.60)$$

O número de estados $\Omega(E)$ existentes numa casca hiper-esférica do espaço de fases contida entre as energias E e $E + dE$, é dado por [242]

$$\Omega(E) \propto \omega(E) dE. \quad (8.61)$$

Se adotamos como coordenadas deste espaço de fases os componentes do momento, passando de coordenadas cartesianas para coordenadas polares, temos

$$\Omega(E) \propto |\mathbf{p}|^{d-1} d|\mathbf{p}|, \quad (8.62)$$

sendo d a dimensão espacial. Pela Eq. (8.60) (adotando um sistema de unidades no qual $c \equiv 1$), temos

$$\Omega(E) \propto E \sqrt{E^2 - m^2} dE. \quad (8.63)$$

Considerando um regime ultra-relativístico, $E \gg m$, temos

$$\Omega(E) \propto E^2 dE, \quad (8.64)$$

portanto, comparando com a Eq. (8.61), a densidade de estados para um gás ideal ultra-relativístico tridimensional fica

$$\omega(E) \propto E^2. \quad (8.65)$$

Com isso, o fluxo de raios cósmicos $\Phi(E)$ fica dado por

$$\Phi(E) = A E^2 p(E), \quad (8.66)$$

sendo A uma constante de normalização.

A Figura 8.9 apresenta os dados, coletados na Ref. [243], correspondentes a oito diferentes observações. Percebemos de imediato que os cálculos baseados na mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs são completamente incapazes de descrever minimamente os dados experimentais, mesmo nas regiões de mais baixas energias (no Detalhe da Figura isto fica ainda mais evidente). O estado, seja estacionário, seja transiente com uma dinâmica lenta, é descrito com uma lei de potência.

Os parâmetros que encontramos foram $q = 1.225$, $1/\beta_q = 9.615 \times 10^7$ eV, $q' = 1.185$ e $1/\beta_{q'} = 1.562 \times 10^9$ eV, tendo como constante de normalização, $A = 5.3 \times 10^{-13}$ (linha cheia na Fig. 8.9). Estes valores correspondem a uma energia de transição (de acordo com a Eq. (8.33)) da ordem de

$$E_{transição} = 8.32 \times 10^{15} \text{ eV}. \quad (8.67)$$

Vale a pena mencionar que o valor da energia de transição, concordante com o observado experimentalmente, é determinado a partir dos quatro parâmetros básicos do modelo, $(q, \beta_q, q', \beta_{q'})$, sem a necessidade de um parâmetro adicional, cuja função seria fixar o joelho em seu valor observado. A curva de Boltzmann-Gibbs foi ajustada com $1/\beta_1 = 1.67 \times 10^8$ eV e $A = 3.0 \times 10^{-13}$.

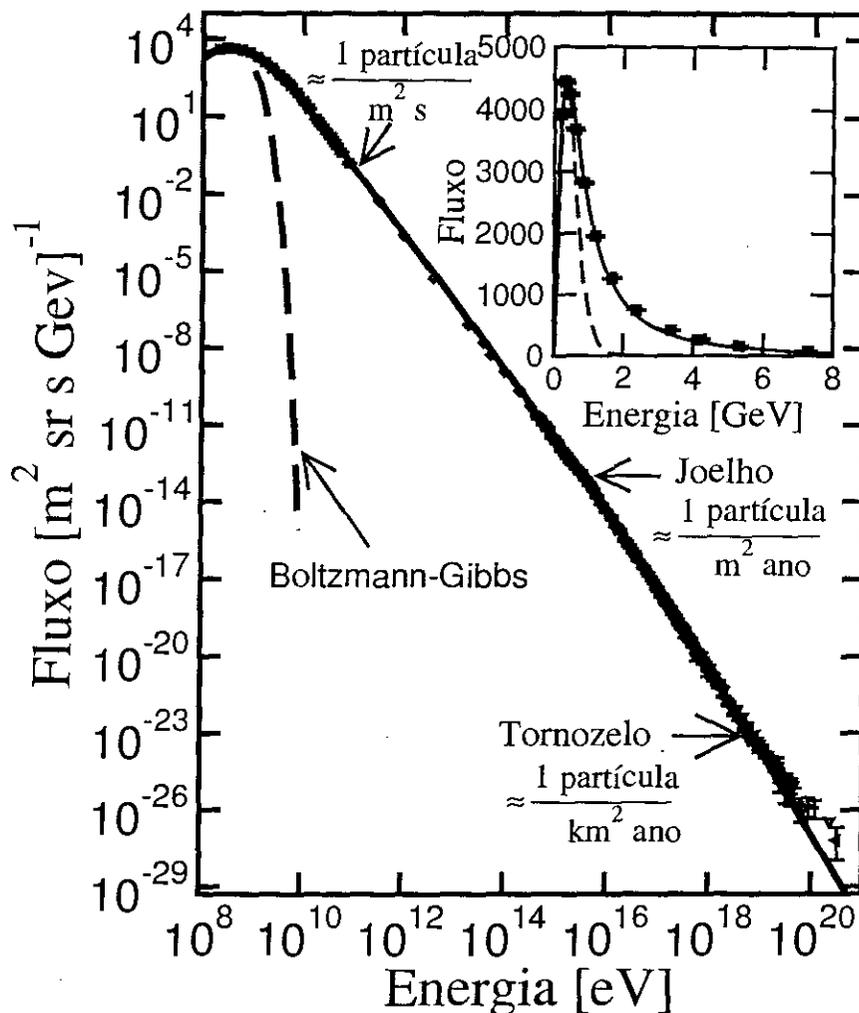


Figura 8.9: Fluxo de raios cósmicos em função de sua energia. Barras de erros experimentais são indicadas sempre que disponíveis. A curva tracejada corresponde à otimizada de acordo com Boltzmann-Gibbs. Valores dos parâmetros da Eq. (8.66): $q = 1.225$, $1/\beta_q = 9.615 \times 10^7$ eV, $q' = 1.185$, $1/\beta_{q'} = 1.562 \times 10^9$ eV e $A = 5.3 \times 10^{-13}$. Detalhe: escala linear-linear para baixas energias.

Calculamos também valores médios da energia da distribuição e seus momentos,

$$\langle E^n \rangle = \frac{\int_0^{E_{corte}} dE E^n \Phi(E)}{\int_0^{E_{corte}} dE \Phi(E)}, \quad (8.68)$$

$$M_n \equiv \langle (E - \langle E \rangle)^n \rangle = \frac{\int_0^{E_{corte}} dE (E - \langle E \rangle)^n \Phi(E)}{\int_0^{E_{corte}} dE \Phi(E)} \quad (8.69)$$

($n = 1, 2, 3$, de acordo com o caso). Quando $E_{\text{corte}} \rightarrow \infty$, $\langle E \rangle$ está relacionado a uma espécie de temperatura dos raios cósmicos e M_2 , seu calor específico. As Figuras 8.10, 8.11 e 8.12 apresentam os resultados. Para valores elevados de energia de corte, $\langle E \rangle$ satura em 2.48944×10^9 eV, valor cerca de dez vezes mais elevado que a temperatura de Hagedorn (próxima de 1.8×10^8 eV), vide Ref. [235, 244, 245]. No mesmo limite, obtemos $M_2 \approx 6.29 \times 10^{21}$ (eV)². Finalmente, M_3 diverge com E_{corte} . Isto é uma consequência de que em limites de altas energias, $\Phi \propto 1/E^{q-1} \sim E^{3.4}$, portanto o integrando do terceiro momento decai com $1/E^{0.4}$, que não é integrável no infinito.

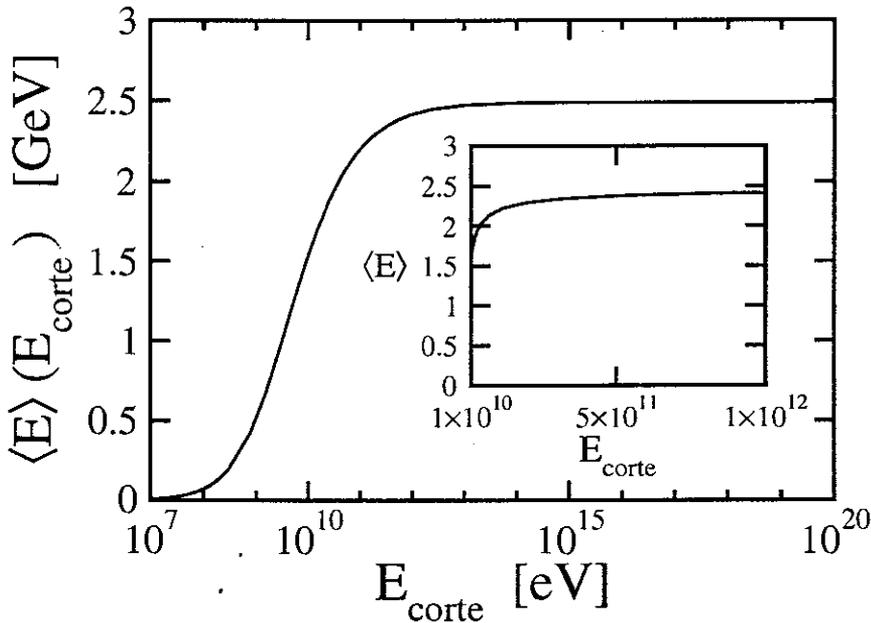


Figura 8.10: $\langle E \rangle$ dos raios cósmicos em função da energia de corte. Abscissa em escala logarítmica, ordenada em escala linear. Detalhe: escala linear-linear. $\langle E \rangle(\infty) \approx 2.489$ GeV (2.882 GeV se calculado usando apenas a q -exponencial, com $\beta_q = 0$).

Podemos tirar algumas conclusões dos resultados ilustrados pelas Figuras 8.9–8.12:

- (i) A concordância com os dados experimentais ao longo de muitas décadas é algo que realmente impressiona e conta a favor da relação entre raios cósmicos e a mecânica estatística não-extensiva;

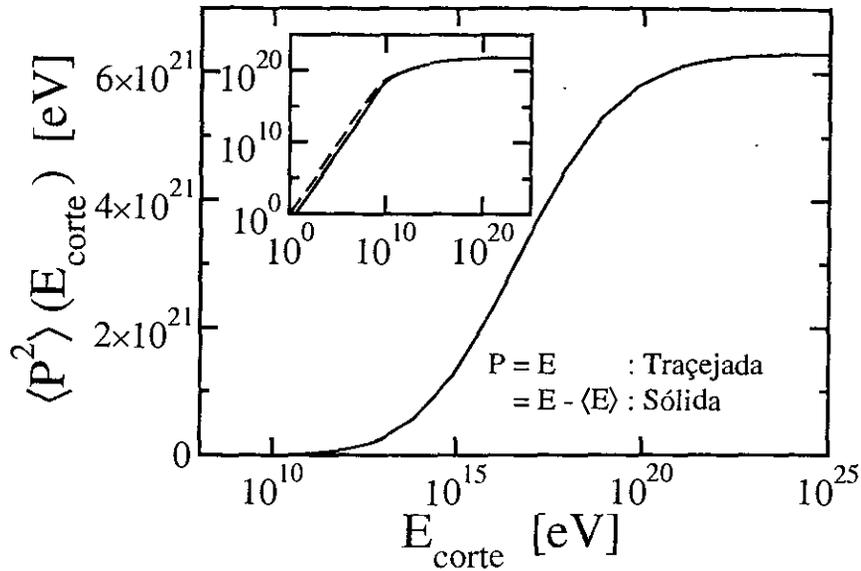


Figura 8.11: $\langle E^2 \rangle$ (linha tracejada) e $M_2 \equiv \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$ (linha sólida, uma espécie de calor específico) dos raios cósmicos em função da energia de corte. Ambas as curvas são muito próximas e são visualmente superpostas em energias elevadas. Abscissa em escala logarítmica, ordenada em escala linear. Detalhe: escala log-log. $M_2(\infty) \approx 6.29 \times 10^{21}$ (eV)².

- (ii) Observando a Equação (8.33), notamos que a transição, ocorrida em energias da ordem de 8.32×10^{15} eV, de acordo com a presente abordagem, está relacionada com energias extremamente inferiores a este valor, da ordem dos parâmetros $1/\beta_q$ e $1/\beta_{q'}$ — temperaturas características do ajuste. Os valores que obtivemos, 9.615×10^7 eV e 1.562×10^9 eV são comparáveis à massa do pión e a transição quark-hadron [246] como também à massa do próton, respectivamente. Isto sugere que a explicação para o joelho deva ser buscada em fenômenos nestas escalas de energia inferiores, e não em energias da ordem do próprio joelho;
- (iii) A existência de dois regimes termo-estatísticos, caracterizados por (q, β_q) e $(q', \beta_{q'})$ pode corresponder a dois mecanismos de aceleração/propagação dos raios cósmicos, relacionados, p. ex., a contribuições galácticas e extra-galácticas;
- (iv) Uma vez que o índice entrópico q está relacionado a (multi)fractalidade, a presente abordagem sugere que o processo de geração e/ou de transporte dos raios cósmicos

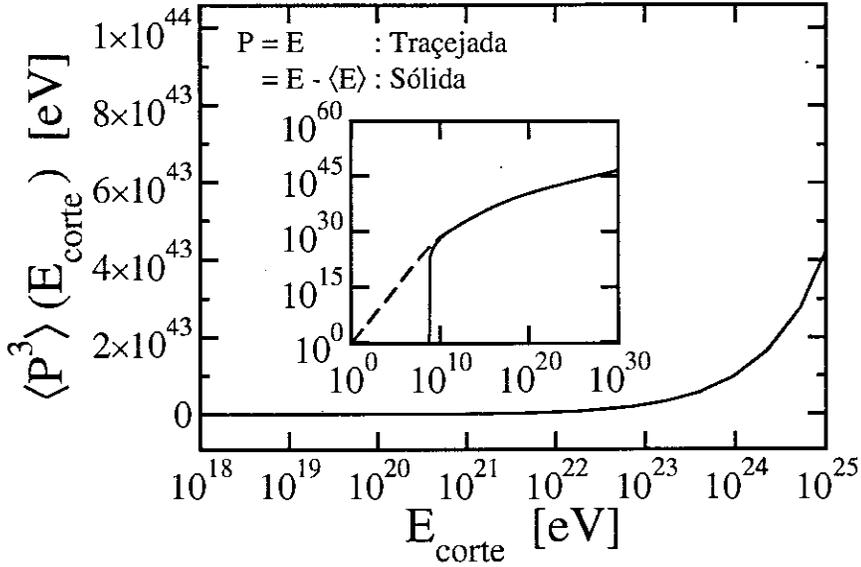


Figura 8.12: $\langle E^3 \rangle$ (linha tracejada) e $M_3 \equiv (E^3) - 3\langle E \rangle \langle E^2 \rangle + 2\langle E \rangle^3$ (linha sólida) dos raios cósmicos em função da energia de corte. As curvas são visualmente superpostas em energias elevadas. Abscissa em escala logarítmica, ordenada em escala linear. Detalhe: escala log-log. Para valores de $E_{\text{corte}} \rightarrow 0$, M_3 vai a zero por baixo, i.e., valores levemente negativos. M_3 diverge com $E_{\text{corte}} \rightarrow \infty$.

ocorram em meios invariantes por escala, que é consistente com a Ref. [247];

- (v) O projeto “Kaskade Colaboration” [248, 249] tem mostrado a relevância de vários constituintes que compõem os raios cósmicos. Para levá-los em conta, a presente abordagem, feita dentro do *ensemble* canônico, pode ser aprimorada, utilizando o *ensemble* gran-canônico;
- (vi) Calculamos os valor médio da energia, $\langle E \rangle \approx 2.489$ GeV, e seu segundo momento $M_2 \approx 6.29 \times 10^{21} (\text{eV})^2$. Relações destes valores com grandezas cosmológicas ou astrofísicas (já conhecidas pela comunidade de raios cósmicos ou ainda a serem calculadas) naturalmente são extremamente bem-vindas.

Mencionamos ainda que a primeira possível interpretação microscópica para nossa abordagem fenomenológica foi sugerida recentemente [250], levando em conta flutuações locais de temperatura e predizendo $q = 11/9 \approx 1.222$, valor muito próximo ao que encontramos. Finalmente chamamos a atenção para uma outra alternativa fenomenológica

para tratamento dos raios cósmicos, utilizando as funções κ -deformadas de Kaniadakis [251] (de acordo com esta proposta, com apenas um parâmetro κ , não é possível descrever o joelho).

8.4 Sistemas sociais

8.4.1 Parcerias sexuais

Recentemente foi divulgado um estudo sobre o comportamento sexual de um grupo aleatório de suecos ao longo de um ano [252]. O objetivo era revelar a estrutura em rede do contato sexual. O grupo em análise consistia em 4 781 suecos (com idades entre 18 e 74 anos) e o índice de respostas do questionário aplicado foi de 59% correspondendo a 2 810 respostas. A Figura 8.13 apresenta a distribuição acumulada de número de diferentes parceiros reportados nos últimos 12 meses antes da aplicação do questionário. Os autores identificam uma lei de potência para ambos os comportamentos feminino e masculino, observando que o número de parceiros reportados pelas mulheres é menor que aquele reportado pelos homens. Trata-se, portanto de um fenômeno livre de escala, e chamou atenção dos autores a diferença para redes de amizades [253], que têm um padrão exponencial ou Gaussiano, portanto, apresentando uma escala típica definida. Particularmente neste último trabalho a que nos referimos, os autores identificam três tipos de redes mundo-pequeno (*small-world*): (i) redes livres de escala (*scale-free networks*), com cauda do tipo lei de potência; (ii) redes livres de escala truncadas (*truncated scale-free networks*), que apresentam um regime intermediário do tipo lei de potência, seguido por uma transição para uma cauda exponencial; (iii) redes com escala (*single scale networks*), que apresentam uma cauda exponencial ou Gaussiana. As redes de amizades são identificadas como do tipo (iii), enquanto a rede de contatos sexuais, do tipo (i). Os autores consideram que as redes livres de escala (tipo (i)) estão relacionadas com o modelo de ligação preferencial de Barabási-Albert [224, 225].

Podemos especular aqui que o tipo (i) de rede do tipo mundo-pequeno pode ser adequadamente descrito com q -exponenciais (ou eventualmente q -Gaussianas); o tipo (ii) com $(q, 1)$ -exponenciais (ou sua equivalente Gaussiana) e finalmente, o tipo (iii) por Gaussia-

nas.

A Figura 8.13 também apresenta curvas, calculadas com uma q -exponencial, Eq. (8.15), com $\gamma = 1$ e normalização considerando o caso discreto, Eq. (8.41). O ajuste é bastante bom, em toda a faixa de dados, e não apenas na cauda.

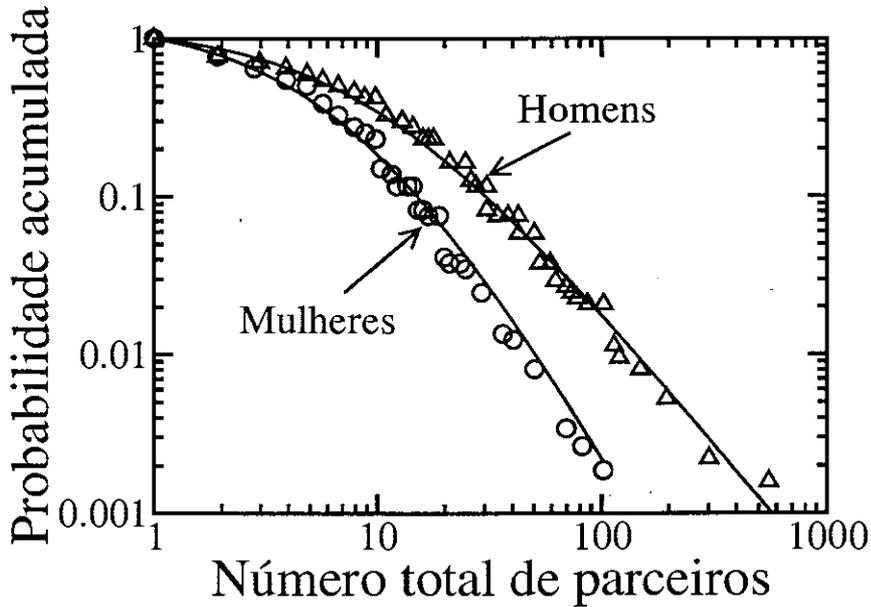


Figura 8.13: Probabilidade acumulada inversa de diferentes parceiros sexuais suecos ao longo de um ano. Os dados foram retirados da Fig. 1 da Ref. [252]. Círculos correspondem às mulheres, e triângulos aos homens. As linhas cheias são q -exponenciais, ajustadas para o caso discreto, i.e., $P(1)=1$. Os parâmetros são para as mulheres $q_F = 1.4$, $1/\beta_{q_F} = 3.33$, e para os homens, $q_M = 1.58$, $1/\beta_{q_M} = 5.55$.

8.4.2 Produto Interno Bruto

Já não é de pouco tempo que a mecânica estatística têm feito colaborações em economia. O neologismo *econofísica* (*econophysics*), cunhado por H. Eugene Stanley, tem sido de uso corrente [254]. Também o periódico *Physica A* aceita artigos nesta nova área. Não vamos fazer aqui um histórico das contribuições e interações entre a Física e a Economia⁷.

⁷Como seria natural esperar, existem muitas críticas a essas abordagens interdisciplinares entre a Física e a Economia questionando inclusive se *econophysics* merece ser considerada uma área. Não vamos entrar no mérito destas questões. Observamos apenas que é uma reação bastante natural economistas temerem “perder território” para outros profissionais. Muitas críticas costumam vir mesmo do ambiente de físicos e matemáticos, vide, p. ex. [255, 256].

Particularmente estamos interessados nos métodos da mecânica estatística não-extensiva e suas aplicações em economia. Talvez o primeiro trabalho fazendo conexões entre mercados financeiros e turbulência, dentro do formalismo não-extensivo, tenha sido as Ref.s [187, 188]. Um recente artigo de revisão pode ser encontrado em [257].

A caracterização de sistemas econômicos, mais especificamente distribuições de rendimentos pessoais (em inglês, *personal income*, abreviaremos por PI), usualmente é assumida seguir a lei de Pareto, Equação (8.2), na região de alta renda e uma distribuição log-normal, Equação (8.5), na região de renda intermediária. Veja as Ref.s [258, 259, 260] para uma recente revisitação desta abordagem para o problema.

Nossa contribuição [261] consiste em analisar um aspecto um pouco diferente dos sistemas econômicos: a distribuição da renda pessoal total (PI) de municípios, como também o produto interno bruto (PIB) desses municípios para um dado país. Ambos, renda pessoal total e produto interno total, podem ser indexados ao valor agregado. Similarmente, consideramos a distribuição do PIB de países do mundo. Utilizamos distribuições pertencentes à família das funções q -exponenciais, que tratamos na Seção 8.2. Particularmente vamos considerar q -exponenciais (ou suas variantes) do tipo $\exp_q(-x)$, com $q \geq 1$ e $x > 0$, o caso que apresenta decaimento com cauda do tipo lei de potência, que é o que vai nos interessar. Seguindo essa linha veremos que, em alguns casos, somos capazes de descrever quase a totalidade do espectro das distribuições, e não apenas as caudas, com uma única função. Isso aponta para uma visão unificada do problema (em vez de considerar uma lei para a região de alta renda e outra lei distinta para a região de renda intermediária). De uma certa maneira este problema se assemelha a outro, o número de citações de artigos científicos, que também apresenta apenas uma cauda do tipo lei de potência. Foi inicialmente conjecturado que diferentes fenômenos governam os artigos muito citados e os pouco citados (vide Ref. [195] e aquelas lá contidas). Uma abordagem não-extensiva do problema [196] mostrou que é possível se ter uma única função capaz de descrever todo o espectro de citações (voltamos a este exemplo na Sub-seção 8.4.5).

Vamos considerar a Eq. (8.30) com $p \equiv P$, sendo P a distribuição de probabilidades acumulada inversa, e $x \equiv x/x_0$, a razão entre uma variável econômica e seu valor mínimo.

No caso discreto, $x_i \equiv x_i/x_{min}$, onde x é a variável econômica, em nossa análise, PI de um município ou PIB de um município (ou país). O índice i se refere ao município (ou país) e o índice min é o município (país) mais pobre (mais baixo no *ranking*).

Analisamos um caso de distribuição de PI: municípios dos Estados Unidos, para os anos entre 1970 e 2000 [262]. Analisamos também três casos de distribuição de PIB: municípios brasileiros (de 1970 a 1996) [263], municípios alemães (de 1992 a 1998) [264] e municípios do Reino Unido (RU) (de 1993 a 1998) [265]. Todos os casos são razoavelmente bem descritos com $\gamma = 2$, i.e., (q, q') -Gaussianas.

A Figura 8.14 ilustra os resultados com as distribuições inversas acumuladas (ou o *rank*, algumas vezes traduzido ao português como *posto*), obtidas pelo produto de P pelo número de municípios $N_{municípios}$. São apresentadas três curvas em cada Fig.8.14(a)–(d): (i) distribuição q -Gaussiana, que descreve os dados da região de baixa renda, (ii) distribuição (q, q') -Gaussiana, que se mostra capaz de reproduzir a região baixa e intermediária, incluindo o joelho (x_q^{**}) e (iii) distribuição log-normal, que foi ajustada para a região intermediária.

Observamos que para os EEUU e o Brasil, a (q, q') -Gaussiana descreve os dados em praticamente toda a faixa de variação do espectro. Já para a Alemanha e o Reino Unido, ambas as curvas (q, q') -Gaussiana e log-normal são capazes de descrever os dados na região baixa e intermediária (as curvas são praticamente indistinguíveis visualmente nesta região). Para os EEUU e Brasil, a curva log-normal falha na região de baixa renda, o que pode ser melhor percebido nos detalhes inseridos nas Figs 8.14(a) e 8.14(b). Os valores dos parâmetros utilizados são apresentados na Tabela 8.2.

Tabela 8.2: Parâmetros para as funções distribuição, para os anos apresentados na Fig. 8.14.

País	Ano	$N_{municípios}$	q	q'	$1/\sqrt{\beta_q}$	$1/\sqrt{\beta_{q'}}$	x_0	σ
EEUU	2000	3110	3.80	1.7	87.71	2236.07	110	7
Brasil	1996	4973	3.50	2.1	40.82	816.50	22	10
Alemanha	1998	440	2.70	1.5	3.16	6.59	3.5	1.5
RU	1998	133	3.12	1.4	18.26	37.80	20	1.5

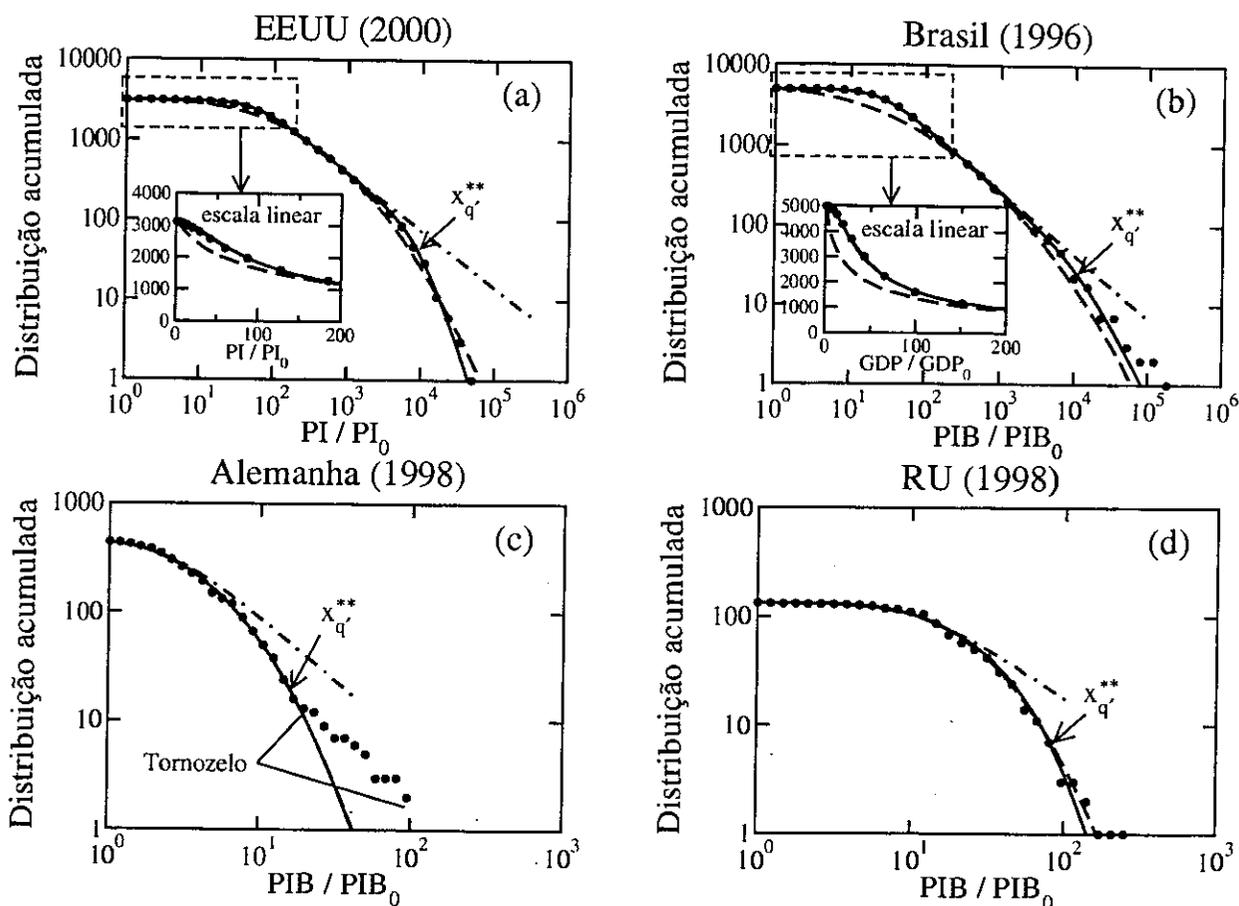


Figura 8.14: Distribuição acumulada inversa para PI/PI_0 (EEUU) e PIB/PIB_0 (Brasil, Alemanha e Reino Unido). São apresentadas três distribuições para comparação: (i) q -Gaussiana (com $\beta_{q'} = 0$) (linha tracejada-pontilhada), (ii) (q, q') -Gaussiana (linha cheia), e (iii) log-normal (linha tracejada). As Figuras (a) e (b) apresentam detalhes com escala linear-linear, para tornar mais evidente a qualidade dos ajustes na região de baixa renda. Nas Figuras (c) e (d), as curvas (q, q') -Gaussiana e log-normal estão superpostas e são indistinguíveis visualmente. São indicadas as posições das transições $x_{q'}^{**}$ (joelho, dado pela Eq. (8.33)). O regime *tornozelo* é praticamente pronunciado em (c), embora esteja também presente nos outros casos.

Regiões de grande PIB apresentam um comportamento diferenciado: a distribuição apresenta uma transição adicional, inclinando-se para cima, e originando um *terceiro* regime em lei de potência. Este efeito é bastante pronunciado para a Alemanha, e em um grau menor para o Reino Unido. Para os EEUU e Brasil, este efeito está praticamente escondido na distribuição histogramada⁸, conforme a Fig. 8.14, mas é visível nos gráficos

⁸Distribuição histogramada é uma tradução livre do inglês para a expressão *binned distribution*. Numa distribuição deste tipo, a ordenada apresenta o número de dados (que pode estar normalizado ou não) que pertencem a um intervalo (usualmente pequeno) da abscissa. Nas Figuras 8.14, esses intervalos

não histogramados. Por exemplo, nos EEUU, apenas os dois maiores municípios (em termos de PIB) (que são Los Angeles e Cook, parte de Chicago) pertencem a este regime. No Brasil, temos São Paulo e Rio de Janeiro dentro deste regime. Esta característica é comum a vários sistemas, algumas vezes denominado *king effect* [266]. Também está presente em raios cósmicos altamente energéticos (como vimos na Sub-seção 8.3.4), sendo referido neste ambiente por *tornozelo (ankle)* [207] (adotamos esta notação nas Figuras). Este comportamento possivelmente está ligado a fenômenos de não equilíbrio, e assim está fora da presente abordagem. Outra possibilidade para explicá-lo é a estatística pobre (reduzido número de pontos). Chamamos a atenção para o fato que o número de municípios nos EEUU e Brasil é cerca de uma ordem de magnitude maior que aquele número na Alemanha e Reino Unido.

A Figura 8.15 apresenta a evolução temporal do parâmetro q . Os EEUU apresentam um crescimento aproximadamente uniforme de q ao longo de 30 anos. No caso do Brasil, a tendência de crescimento entre 1970 até 1990 foi quebrada de 1990 a 1996. A Alemanha e o Reino Unido apresentam valores constantes de q nos períodos para os quais temos dados disponíveis. O crescimento do parâmetro q (observado para os EEUU e Brasil) indica um crescimento da *desigualdade*: quanto maior q , mais extensa é a cauda, portanto maior a probabilidade de encontrarmos municípios muito mais ricos que outros. O parâmetro q' (para um dado país) se mostrou constante para os anos observados. Os valores menores de q e q' para a Alemanha e Reino Unido, quando comparado com os valores para os EEUU e Brasil, refletem uma distribuição de valor agregado mais balanceada para estes países europeus, em relação aos países americanos analisados. A relação entre as inclinações (associadas aos valores de q) e a igualdade/desigualdade não é uma conclusão nova; é conhecida desde Pareto [200] (vide também Ref. [267] e outras lá contidas).

Analisamos também a distribuição de PIB's dos países do mundo, para o ano 2000 [268]. Neste caso, observamos que a função (q, q') -exponencial (com $\gamma = 1$ na Eq. (8.30)) se ajusta melhor aos dados que a função (q, q') -Gaussiana (com $\gamma = 2$) na região de renda

estão igualmente espaçados em escala logarítmica, i.e., sua largura cresce exponencialmente. Nas distribuições não histogramadas, cada ponto do gráfico corresponde a um dado original. Foi escolhida a forma histogramada para esta Figura 8.14 para melhor visualização.

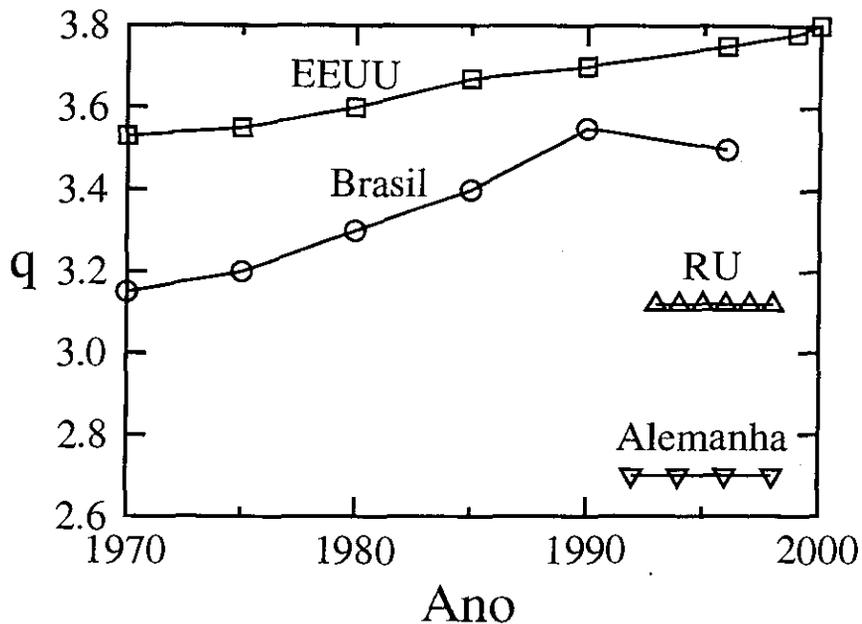


Figura 8.15: Evolução do parâmetro q para os EEUU (quadrados), Brasil (círculos), Reino Unido (triângulos) e Alemanha (triângulos invertidos). Os parâmetros q' (para cada país) são constantes para todos os anos: $q'_{Brasil} = 2.1$, $q'_{EEUU} = 1.7$, $q'_{Alemanha} = 1.5$, $q'_{RU} = 1.4$. As linhas são apenas guia para os olhos.

baixa e intermediária. Embora a diferença entre as duas funções ($\gamma = 1$ e $\gamma = 2$) seja perceptível, ela não é tão grande, portanto esta observação puramente fenomenológica merece investigação posterior, para que os resultados possam ser corroborados ou não. Acaso se confirme ser $\gamma = 1$, uma possível interpretação pode ser devido a natureza das interações entre países, que imaginamos ser diferente daquelas entre municípios dentro de um mesmo país. A Figura 8.16 apresenta os resultados. O *king effect* também está presente aqui, particularmente para os dois países de maior PIB, EEUU e Japão.

8.4.3 Distribuições geográficas

Nesta Sub-seção apresentamos exemplos de distribuições relacionadas com distribuições geográficas. Especificamente vamos abordar áreas de municípios (exemplificados com municípios brasileiros) e preços de terras negociadas no Japão.

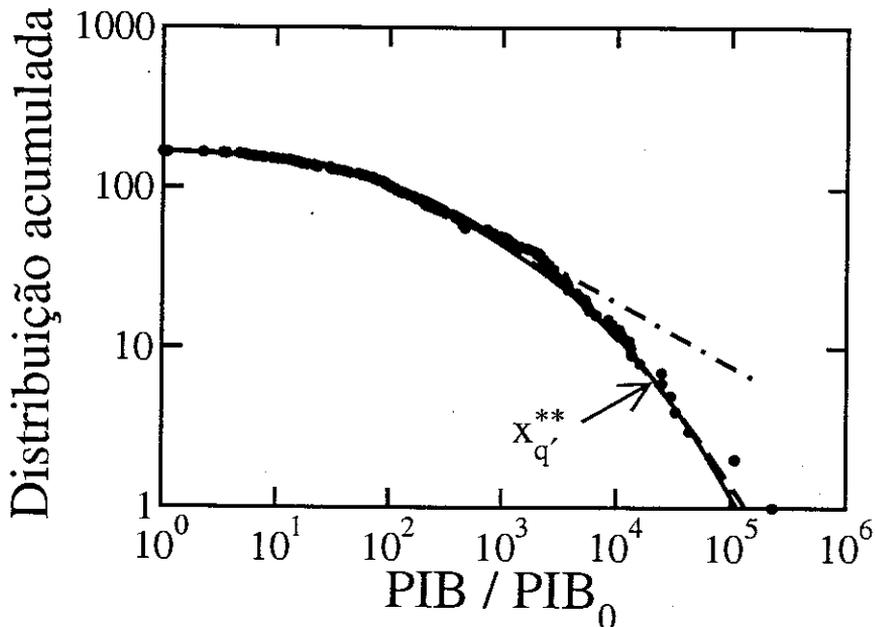


Figura 8.16: Distribuição acumulada inversa de PIB/PIB_0 de 167 países para o ano 2000 (dados não histogramados: cada ponto corresponde a um país). Os dados foram ajustados a uma (q, q') -exponencial (linha cheia) e a uma distribuição log-normal (linha tracejada) — ambas as curvas são indistinguíveis visualmente neste exemplo. A q -exponencial (com $\beta_{q'} = 0$, linha tracejada-pontilhada) também é apresentada, para comparação. Os valores dos parâmetros são $q = 3.5$, $q' = 1.7$, $1/\beta_q = 111.1$, $1/\beta_{q'} = 2500.0$. O joelho, de acordo com a Eq. (8.33), é localizado em $\text{PIB}/\text{PIB}_0 = 19\,665$. A curva log-normal é obtida com $x_0 = 220$ e $\sigma = 13$.

Áreas de municípios

Consideremos as áreas de todos os municípios brasileiros do ano 1998 [269]⁹. O menor deles, Santa Cruz de Minas (MG), tem 2.9 km^2 , enquanto o maior, Altamira (PA), tem $161\,446 \text{ km}^2$. Trata-se de uma variação significativa. Apenas para termos uma idéia comparativa, Altamira é maior que 12 estados brasileiros; é pouco maior que o Acre e pouco menor que o Paraná. Maior também que países como Áustria, Portugal, Bulgária, Grécia. São muitas as causas que levam um município ter uma certa área, incluindo, dentre outras, fatores geográficos, políticos, demográficos, econômicos. Apesar desta complexidade de influências, é interessante observar que uma única curva, a (q, q') -Gaussiana (dada

⁹As áreas dos municípios são calculadas pelos métodos tradicionais dos geógrafos. Não estamos considerando uma possível estrutura fractal, comum nessas distribuições geográficas.

pela solução da Eq. (8.30) com $\gamma = 2$), se ajusta bastante bem a praticamente todos os municípios brasileiros (5507 municípios no ano 1998), desde o menor deles até o maior. A Figura 8.17 ilustra os resultados.

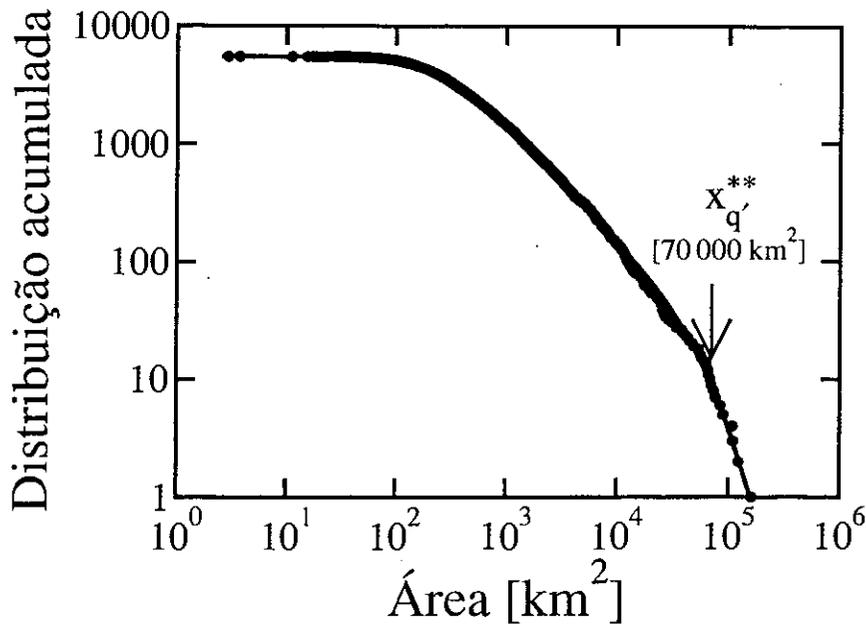


Figura 8.17: Distribuição acumulada inversa de áreas dos municípios brasileiros (dados não histogramados). A linha cheia é uma (q, q') -Gaussiana com $q = 3.07$, $q' = 1.56$, $1/\sqrt{\beta_q} = 353.55 \text{ km}^2$, $1/\sqrt{\beta_{q'}} = 11\,226.7 \text{ km}^2$.

Preços de terras no Japão

O problema do preço de terras no Japão foi recentemente considerado na Ref. [270]. O autor encontrou uma cauda em lei de potência para distribuição acumulada de preços de terras, com uma inclinação de -1.7 ($P(X \geq x) \propto x^{-1.7}$). A Figura 8.18 evidencia que uma q -Gaussiana (Eq. (8.15) com $\gamma = 2$) ajusta toda a faixa de dados, exceto o último ponto correspondente aos preços mais altos. Chamamos atenção que a distribuição de probabilidades da Ref. [270] está histogramada. Talvez com os dados originais (total de 30 600 pontos) seja possível fazer a curva se ajustar a este ponto final (ou aos pontos finais da cauda) através da equação com transição para uma cauda exponencial, Eqs (8.23)–(8.24), ou então através da equação com transição para um segundo regime em lei de

potência, Eq.s (8.30)–(8.31).

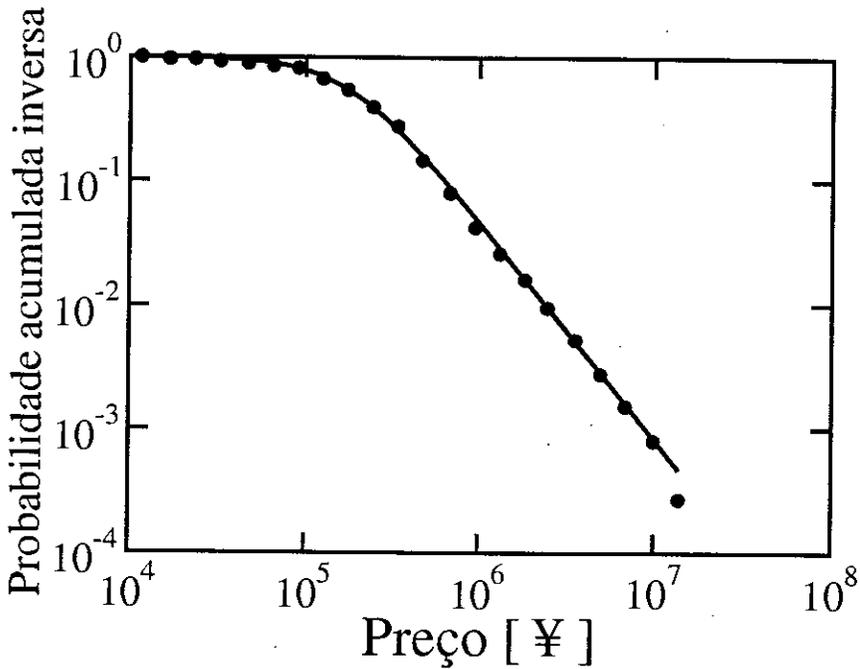


Figura 8.18: Distribuição acumulada inversa de preços de terra no Japão, para o ano 1998. Os dados (histogramados) foram retirados da Fig. 1 da Ref. [270]. A linha cheia é uma q -Gaussiana com $q = 2.136$, que corresponde à inclinação de -1.76 (encontrada pelo autor de [270]), e $1/\sqrt{\beta_q} = 188\,982$ Yen.

8.4.4 Colaborações entre cientistas

Em um recente trabalho, Mark E. J. Newman analisou redes de colaborações entre cientistas [271]. Trata-se de um artigo pertencente a uma série de outros (p. ex. [272, 273]), incluindo um trabalho de revisão [274].

Nosso trabalho nesta Sub-seção é analisar, dentro da ótica não-extensiva, o exemplo analisado em [271]: redes de co-autoria acadêmica onde os vértices representam os autores dos artigos e dois vértices estão ligados se os dois indivíduos em questão foram co-autores em um artigo comum. Foram dois os exemplos analisados: (i) uma rede de colaborações entre 1.5 milhões de cientistas em biomedicina, de todas as publicações constantes entre 1995 e 1999 na base de dados de medicina; (ii) uma rede de colaborações entre 250 mil

matemáticos catalogados no Mathematical Reviews. Na sua Figura 4, ele apresenta o grau de distribuição destas redes (grau de um vértice é o número de ligações conectadas àquele vértice). Nossos resultados aparecem na Figura 8.19¹⁰. As colaborações entre biomédicos fica bem ajustada por uma q -exponencial, Eq. (8.15) com $\gamma = 1$, enquanto as colaborações entre matemáticos necessita da curva com dois regimes de lei de potência, a (q, q') -exponencial, Eq.s (8.30) e (8.31) (também com $\gamma = 1$). Em ambos os casos, consideramos a natureza discreta dos problemas, i.e., a normalização obedece a Eq. (8.41).

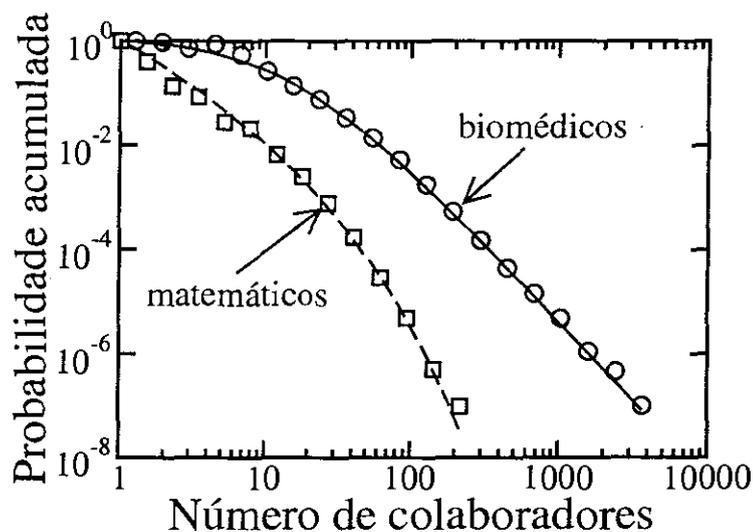


Figura 8.19: Probabilidade acumulada inversa de número de autores nas áreas de biomedicina (círculos) e matemática (quadrados), em função do grau de conectividade, durante o período de 1995 a 1999. Os biomédicos são bem ajustados por uma q -exponencial (linha cheia), com $q = 1.33$, $1/\beta_q = 5.26$ e $N(1) = 156\,023$. Os matemáticos são ajustados por uma (q, q') -exponencial (linha tracejada), com $q = 1.5$, $q' = 1.1$, $1/\beta_q = 0.2$ e $1/\beta_{q'} = 4.54$, $N(1) = 183\,591$. Os dados da Ref. [271] estão normalizados na presente Figura (nossa abscissa é a probabilidade acumulada).

8.4.5 Medida de sucesso entre músicos

Nesta Sub-seção analisamos a distribuição de uma possível medida de sucesso de músicos (música popular). Recentemente J.A. Davies [275] considerou este problema. O índice de sucesso adotado foi o número de semanas que um músico ou uma banda permanecem

¹⁰Os dados originais foram gentilmente cedidos por Mark Newman.

na lista semanal dos 75 mais vendidos. A análise foi feita com as vendas de álbuns na Grã-Bretanha, abrangendo um período de 50 anos, de 1950 a 2000 (uma publicação do Guinness, [276]). O autor conclui que a distribuição acumulada é uma exponencial esticada, Eq. (8.7), resultado similar ao encontrado em outro problema, uma medida do sucesso de cientistas, realizado inicialmente por Laherrère e Sornette [266]. O índice de sucesso de um cientista adotado foi o número de citações de seus trabalhos catalogados pelo ISI Web of Knowledge [277] (eles analisaram os 1120 cientistas mais citados, no período entre 1981 e 1997). Na Ref. [275] são feitos comentários interessantes sobre semelhanças e diferenças entre o trabalho de cientistas e de músicos: ambos são manifestações da criatividade humana; mas existem aspectos bastante diferenciados: enquanto a vendagem de músicas é controlada por fatores sociais, econômicos, propaganda, moda, além da qualidade dos músicos e de seus trabalhos, citações de trabalhos científicos são feitas pelos próprios cientistas, que são, por sua vez, também autores. Assim, o ambiente científico forma uma rede fechada. Em seguida ao trabalho de Laherrère e Sornette, onde foram identificadas distribuições do tipo exponenciais esticadas, Redner [195] analisou as citações de trabalhos individuais (e não citações de cientistas ao longo de toda sua vida, como em [266]). Em sua análise, concluiu que os trabalhos mais citados seguem uma lei de potência, enquanto os menos citados seguem uma distribuição exponencial esticada, i.e., fenômenos diferentes governariam os artigos de maior repercussão e aqueles de repercussão limitada.

Posteriormente, a distribuição das citações de trabalhos foi revisitada, agora com o formalismo não-extensivo [196]. Com este artigo, Constantino Tsallis e Márcio P. de Albuquerque, conseguiram uma abordagem unificada para o problema — uma única função, a q -exponencial, é capaz de descrever toda a faixa de dados, mostrando que não são fenômenos diferentes que governam o problema.

Nossa contribuição [216] segue uma linha similar. Consideramos as funções não-extensivas, e as comparamos com a exponencial esticada encontrada por Davies. Verificamos que a distribuição acumulada de sucesso dos músicos (os pontos foram capturados da Ref. [275], pois não tivemos acesso à Ref. [276]) pode ser descrita com a Eq. (8.24)

($\gamma = 1$) com, no mínimo, igual adequação em relação à exponencial-esticada, Eq. (8.7). A Figura 8.20 apresenta os resultados. A linha cheia é a dada pela Eq. (8.24), visível com dificuldade, por passar sobre os pontos. A linha tracejada é a exponencial esticada encontrada em [275]. No Detalhe, mostramos a distribuição acumulada inversa versus a função auxiliar

$$f_{aux} = \log [1 - \beta_q/\beta_1 + \beta_q/\beta_1 e^{(q-1)\beta_1 x}]. \quad (8.70)$$

A Eq. (8.24) se apresenta como uma reta neste gráfico linear-linear. O Detalhe mostra visualmente a adequação do ajuste. Percebemos que a linha tracejada não cobre tão bem os pontos, enquanto a linha cheia fica praticamente indistinguível deles. O coeficiente de correlação linear dos dados com essa variável independente, Eq. (8.70), é de $r^2 = 0.9975$. Os parâmetros utilizados são: $q = 2.2$, $1/\sqrt{\beta_q} = 6.25$ semanas, $1/\sqrt{\beta_q'} = 100$ semanas, na Eq. (8.24), e $x_0 = 9.37$ semanas, $c = 0.5$ na Eq. (8.7), valores reportados por [275].

Este sistema apresenta o dito *king effect*, também comum aos raios cósmicos (Sub-seção 8.3.4) e a distribuição de Produtos Internos Brutos (Sub-seção 8.4.2). Os mais vendidos na Grã-Bretanha, nesta pesquisa, são Elvis Presley e Cliff Richard.

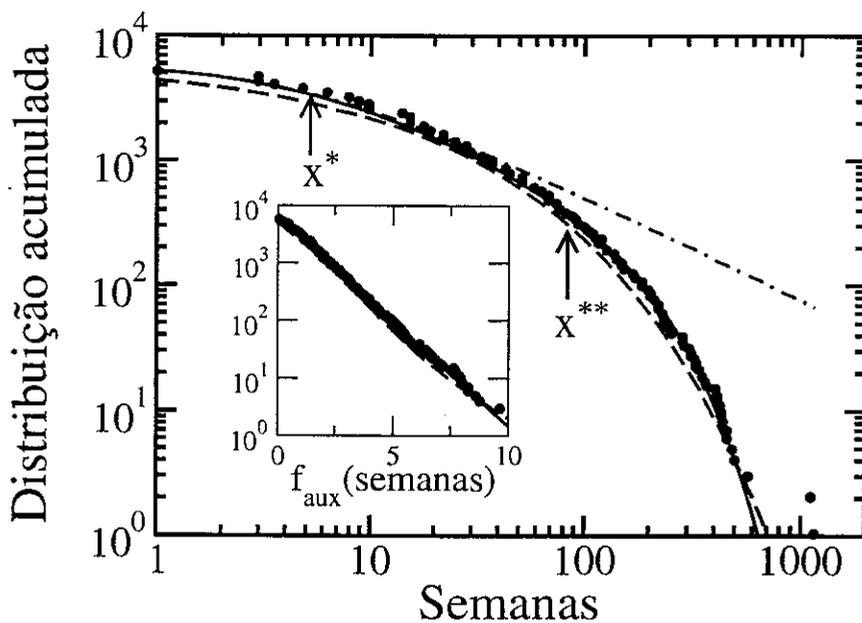


Figura 8.20: Distribuição acumulada inversa de músicos mais vendidos na Grã-Bretanha. Os dados foram retirados da Fig 1(b) da Ref. [275]. A linha cheia é uma $(q, 1)$ -exponencial, e a linha tracejada, a exponencial esticada utilizada em [275]. A linha tracejada-pontilhada é uma q -exponencial (com $\beta_{q'} = 0$), mostrada para comparação. Detalhe: Distribuição acumulada versus a função auxiliar Eq. (8.70), em escala linear-linear. A Eq. (8.24) é uma linha reta neste gráfico. Caso os pontos obedecam a esta distribuição, eles também ficam aproximadamente lineares, como indica a figura. Os dois pontos de maior posto não estão mostrados no Detalhe, pois eles visivelmente se afastam da curva.

Capítulo 9

Conclusões

Neste Capítulo derradeiro, apresento um resumo da Tese. Me permito também esboçar certas reflexões filosóficas de cunho pessoal.

A mecânica estatística tem sido objeto de controvérsias, desde os primeiros momentos, com as fortes objeções que eram feitas a Ludwig Boltzmann. O tempo se encarregou de mostrar aos energeticistas da época que a visão de Boltzmann estava correta. Infelizmente tarde demais para ele próprio (Ludwig). De um quadro inicial de rejeição, a mecânica estatística passou para o pólo oposto, de sagração.

A teoria não-extensiva, proposta por Constantino Tsallis em 1988 com seu trabalho seminal [9], e desenvolvida por vários cientistas de diversas partes do mundo¹, tem sido recebido pela comunidade científica com sentimentos ambivalentes e controvérsias, vide, p. ex., [278, 279, 280, 281, 282, 283]. Não vamos entrar no mérito dos argumentos utilizados. Recentemente, em um artigo de revisão [24], Tsallis apresenta seu ponto de vista, replicando várias destas críticas, algumas ingênuas, outras mais profundas.

De acordo com Angel Plastino [284], muitas das polêmicas que envolvem a mecânica estatística estão relacionadas a aspectos psicológicos do ser humano, que usualmente não lida bem com as incertezas. A mecânica estatística é a ciência do saber incompleto [285], portanto causa incômodo. Michel Baranger (citado em [278]) também aponta para outras motivações psicológicas para muitas das críticas que a mecânica estatística não-extensiva tem recebido, às vezes mesmo se confundindo com críticas pessoais ao autor. Algumas têm essa motivação essencial; a maioria das críticas parecem ter origem no verdadeiro

¹Vide uma bibliografia constantemente atualizada em [26].

desejo de conhecer o comportamento da natureza.

Apesar das agitações, a mecânica estatística não-extensiva tem se desenvolvido basicamente ao longo de três linhas complementares:

(i) Muitos trabalhos têm observado (*in vitro*, *in vivo* e *in silico*) comportamentos que têm sido bem descritos de acordo com este formalismo. Apresentamos alguns deles na Parte II da presente Tese. Este é um dos pontos de partida da ciência, iniciar com a observação da natureza. Claramente não é uma garantia ou uma prova de que este formalismo não-extensivo é o mais adequado. Podem existir vários outros que possam ser igualmente capazes de descrever os mesmos fenômenos. Nossa Figura 8.3, p. ex., compara uma q -exponencial com uma exponencial esticada, para uma pequena faixa da variável independente, mostrando ser indiscernível qual a melhor função para um conjunto limitado de dados naquela situação. Não é garantia, nem é conclusivo, mas um ponto de partida. Destacamos uma recente aplicação [99] (vide final da Seção 4.3), onde funções q -hiperbólicas são consistentemente utilizadas na descrição do comportamento de um material magnético.

(ii) Existem também trabalhos que desenvolvem aspectos formais e conseqüências matemáticas decorrentes da mecânica estatística não-extensiva. A Parte I da presente Tese foi dedicada a este tema. Esta linha de trabalhos formam outro aspecto importante para uma teoria científica: coerência em sua estrutura lógica.

(iii) Ainda mais é exigido para que uma dada área do saber seja considerada uma teoria científica. É necessário ter um caráter preditivo, i.e., ser capaz de prever comportamentos antes inesperados, a partir de suas premissas. Com isto, ela poderia ser considerada uma teoria fechada. Esta parte é, seguramente, uma das mais difíceis de ser alcançada. Aqui também muitos esforços tem sido feitos, e os primeiros resultados satisfatórios começam a aparecer. Destacamos alguns exemplos, dentre outros já mencionados em capítulos anteriores:

Nos exemplos em sistemas dinâmicos de baixa dimensionalidade, que apresentamos no Capítulo 6, Seção 6.1, citamos quatro métodos distintos, que *estimam* o valor do índice entrópico q_{sen} a partir da dinâmica do sistema, obtendo, como deveria ser, o mesmo valor.

Também existem exemplos em sistemas dissipativos de alta dimensionalidade, especialmente sistemas com turbulência completamente desenvolvida. Os trabalhos de Christian Beck têm avançado importantes e inovadoras abordagens para o problema, com conexões com a mecânica estatística não-extensiva, conseguindo, inclusive, estimar valores para os índices entrópicos q , e com concordâncias com resultados experimentais impressionantes [160, 161, 186]. Impressionam também os resultados obtidos também em turbulência por Arimitsu e Arimitsu [162, 163]. Os índices entrópicos que eles encontram são de naturezas distintas, e possivelmente relacionados, conforme conjectura apresentada na Seção 6.3.

Ainda dentro dos sistemas de alta dimensionalidade, também destacamos o trabalho de Beck [250], propondo um método para estimar o valor do índice q que encontramos nos raios cósmicos [238] (Sub-seção 8.3.4).

Concordância com resultados experimentais, coerência lógica, predictibilidade são exigências essenciais em qualquer teoria científica, mas naturalmente não são únicas. É necessário ainda satisfazer todas as questões epistemológicas, como a falseabilidade de Karl Popper [286].

A mecânica estatística não-extensiva não é contrária a Boltzmann. Seu desenvolvimento tem buscado a essência de suas idéias, colocando a *mecânica* em um nível epistemológico mais fundamental, de onde decorrem as propriedades macroscópicas. Este esquema também está de acordo com as idéias de Einstein [287, extraído de [37]]

“In order to calculate W , one needs a complete (molecular-mechanical) theory of the system under consideration. Therefore it is dubious whether the Boltzmann principle has any meaning without a complete molecular mechanical theory or some other theory which describes the elementary processes. $S = k \ln W + \text{constant}$ seems without content, from a phenomenological point of view, without giving in addition such an Elementartheorie.”

A noção que a mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs apresenta limitações a serem superadas é antiga. A Ref. [37] nos remete também a uma citação de Enrico Fermi [288]:

“The entropy of a system composed of several parts is very often equal to the sum of the entropies of all the parts. This is true if the energy of the

system is the sum of the energies of all the parts and if the work performed by the system during a transformation is equal to the sum of the amounts of work performed by all the parts. Notice that these conditions are not quite obvious and that in some cases they may not be fulfilled.”

Ainda da Ref. [37] tomamos o comentário de Peter Landsberg [289, p. 102]:

“The presence of long-range forces causes important amendments to thermodynamics, some of which are not fully investigated as yet.”

Estes comentários servem para ilustrar que a posição quase sagrada que a mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs na qual fora colocada estava excessivamente elevada, por mais respeito e admiração que tenhamos (e devemos tê-los) pelo seu formalismo. Mais de um século após sua fundação, chegara a hora de dar um salto a frente.

Retomemos rapidamente algumas conclusões que tratamos no presente trabalho (algumas nossas, outras de diferentes autores).

- (i) A mecânica estatística não-extensiva é aplicável a (vários) sistemas que se encaixam na categoria de *complexos* (alguns apresentados da Parte II da presente Tese);
- (ii) Verificamos a existência de mais de um valor de q para caracterizar completamente um sistema. Um deles está relacionado aos processos de sensibilidade às condições iniciais ($q_{sen} < 1$), e o outro está relacionado aos processos de relaxação ao estado estacionário ($q_{rel} > 1$). Este último é dependente da granulação adotada no problema. Verificamos que ambos q_{sen} e q_{rel} são ligados através de uma relação de escala de tamanho finito, pelo menos nos mapas do tipo logístico (Capítulo 6). É possível a existência de um *terceiro* valor do índice entrópico, conjecturado em [24]: $q_{stat} > 1$, relacionado aos estados estacionários;
- (iii) Verificamos computacionalmente (corroborando verificações anteriores de outros autores) a conjectura da não comutatividade dos limites macroscópico e temporal do estado de equilíbrio termodinâmico, para sistemas com interações de longo alcance (Capítulo 7), originalmente apresentada em [22];

- (iv) Desenvolvemos alguns aspectos matemáticos conseqüentes das definições das funções q -logaritmo e q -exponencial, uma possível generalização da transformada de Laplace, das funções trigonométricas e hiperbólicas, incluindo uma generalização do Teorema de Pitágoras, uma deformação associada à álgebra e ao cálculo, e ainda desenvolvemos uma aplicação em processamento de sinais, mais especificamente na análise de wavelets (Parte I da presente Tese);
- (v) Generalizamos a entropia não-extensiva S_q (que é mono-indicial) por uma forma entrópica bi-indicial $S_{q,q'}$ (Seção 1.3).

Algo parece certo: o índice q não é uma constante universal da natureza. É um índice (ou um conjunto inter-relacionado deles) característico de cada classe de sistema particular. A Ref. [39] apresenta alguns comentários epistemológicos sobre a mecânica estatística não-extensiva.

Uma área muito grande da Física está sendo ampliada desde suas bases mais fundamentais. Um trabalho deste porte demanda tempo. Muito há o que ser feito, refeito, descoberto, inventado. Enumeramos algumas possibilidades de trabalhos futuros, conseqüência dos que apresentamos anteriormente:

- (i) Posteriores desenvolvimentos dos aspectos formais (matemáticos) da mecânica estatística não-extensiva, como, p. ex., a transformada de Laplace utilizando o núcleo $\exp_q(-st)$ (item (i) da pag. 49); o desenvolvimento da generalização da transformada de Fourier (embora princípios deste trabalho já tenham sido realizados, vide p. 48; aprofundamento das conseqüências da q -álgebra e do q -cálculo; novas aplicações das q -funções em processamento de sinais e em outras áreas da ciência e da tecnologia; desenvolvimento das conseqüências físicas da entropia bi-indicial $S_{q,q'}$ (Seção 1.3), como também das conseqüências matemáticas decorrentes das funções $\ln_{q,q'}$ e $\exp_{q,q'}$ (Ref. [11]);
- (ii) O mapa logístico, e toda sua família, tem gradativamente revelado aspectos surpreendentes e não imaginados. Investigações adicionais para corroborar a relação

de tamanho finito, Equação (6.16), e também em outros mapas; verificação da dualidade (ou possível trindade) dos índices entrópicos q (q_{sen} , q_{rel} e q_{stat}) em outros sistemas, e possíveis relações de escala entre eles; corroboração da dependência da granulação (*graining*) de q_{rel} ;

- (iii) Aprofundamento da análise do regime meta-estável (primeiro patamar da Figura 7.19, p. ex.), identificando qual a sua distribuição de velocidades, quais as condições iniciais que levam a este regime e quais as que levam diretamente ao estado terminal de Boltzmann-Gibbs; verificação da lei zero da termodinâmica.

Descartes, em seu Discurso do Método, estabeleceu uma via espetacular para a ciência. Colocou a dúvida como um dos pontos altos do método (não a dúvida pura e simples, não a dúvida descrente, a dúvida adolescente, poderíamos denominá-la, mas a dúvida metódica, como ele a explica). Este é um ponto permanente, como verificamos na opinião de Feynman, apresentada na nota ao pé da página 18.

Descartes também nos ensinou a maneira de decompor sistemas compostos em partes mais simples, fazer esse processo até que cheguemos a partes suficientemente simples de modo que tenhamos condições de tratá-las, de obter respostas (vide nota ao pé da página 117). Depois, recompor o sistema (uma vez que sabemos como o decompos, temos como fazer o caminho inverso). Em termodinâmica este sistema mais simples é chamado sistema isolado, para o qual sua energia é constante e sua entropia tende a um máximo. Em mecânica estatística trata-se do *ensemble* microcanônico.

A questão que se coloca é: São todos os sistemas decomponíveis, ou haveriam alguns sistemas que não podem ser decompostos em sub-sistemas isolados? Surge este ponto porque, como mencionamos, os sistemas complexos são dependentes do contexto, i.e., holísticos. Eis mais uma questão em aberto. São muitas ainda não respondidas. Fiquemos felizes por estarmos vivendo esta época, ainda com esperanças que o quadro fique mais bem definido em uma escala temporal que nos permita saber algumas respostas!!

Finalmente acrescentamos uma característica que, segundo a opinião de várias pessoas (e que nós também compartilhamos), uma área do conhecimento deva ter para ser considerada uma teoria. Conforme aprendi com Constantino, *teoria* em grego vem da visão do Divino. Então deve estar ligada à Verdade e à Beleza, idéias platônicas que andam juntas. Embora seja difícil, ou talvez mesmo impossível definir a Beleza, uma teoria deve necessariamente ser bela! Cabe a nós a reconhecermos. Segundo nos parece, a mecânica estatística não-extensiva apresenta muitos elementos de Beleza. Seguimos o raciocínio de Dirac [290] e isso nos enche de esperanças quanto ao extenso (não-extensivo) futuro:

“I think that there is a moral to this story, namely that it is more important to have beauty in one’s equations than to have them fit experiment.

It seems that if one is working from the point of view of getting beauty in one’s equations, and if one has really a sound insight, one is on a sure line of progress.

If there is not complete agreement between the results of one’s work and experiment, one should not allow oneself to be too discouraged, because discrepancy may well be due to minor features that are not properly taken into account and that will get cleared up with further developments of the theory.”

Paul Adrian Maurice Dirac (1902–1984)

Apêndice A

Integrais q -Gaussianas

Em diversas situações pode ser útil ter em mãos integrais envolvendo q -Gaussianas. Aqui as apresentamos, bem como suas transformadas de Fourier.

Os casos $q > 1$ e $q < 1$ podem ser obtidos, por exemplo, a partir da Ref. [85, Eq.s 3.251 2 e 3.251 1]:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left[e_q^{-ax^2} \right]^\nu = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{\Gamma\left(\frac{\nu}{q-1} - \frac{1}{2}\right)}{(q-1)^{1/2} \Gamma\left(\frac{\nu}{q-1}\right)} \quad (1 < q < 1 + 2\nu), \quad (\text{A.1})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 \left[e_q^{-ax^2} \right]^\nu = \frac{1}{2a} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{\Gamma\left(\frac{\nu}{q-1} - \frac{3}{2}\right)}{(q-1)^{3/2} \Gamma\left(\frac{\nu}{q-1}\right)} \quad (1 < q < 1 + \frac{2\nu}{3}), \quad (\text{A.2})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^4 \left[e_q^{-ax^2} \right]^\nu = \frac{3}{4a^2} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{\Gamma\left(\frac{\nu}{q-1} - \frac{5}{2}\right)}{(q-1)^{5/2} \Gamma\left(\frac{\nu}{q-1}\right)} \quad (1 < q < 1 + \frac{2\nu}{5}), \quad (\text{A.3})$$

$$\int_{-x_c}^{x_c} dx \left[e_q^{-ax^2} \right]^\nu = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{\Gamma\left(\frac{\nu}{1-q} + 1\right)}{(1-q)^{1/2} \Gamma\left(\frac{\nu}{1-q} + \frac{3}{2}\right)} \quad (q < 1), \quad (\text{A.4})$$

$$\int_{-x_c}^{x_c} dx x^2 \left[e_q^{-ax^2} \right]^\nu = \frac{1}{2a} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{\Gamma\left(\frac{\nu}{1-q} + 1\right)}{(1-q)^{3/2} \Gamma\left(\frac{\nu}{1-q} + \frac{5}{2}\right)} \quad (q < 1), \quad (\text{A.5})$$

$$\int_{-x_c}^{x_c} dx x^4 \left[e_q^{-ax^2} \right]^\nu = \frac{3}{4a^2} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{\Gamma\left(\frac{\nu}{1-q} + 1\right)}{(1-q)^{5/2} \Gamma\left(\frac{\nu}{1-q} + \frac{7}{2}\right)} \quad (q < 1). \quad (\text{A.6})$$

O limite $q \rightarrow 1$ é dado por

$$\lim_{q \rightarrow 1+0} \frac{\Gamma\left(\frac{\nu}{q-1} - \alpha\right)}{(q-1)^\alpha \Gamma\left(\frac{\nu}{q-1}\right)} = \nu^{-\alpha} \quad \left(1 < q < 1 + \frac{\nu}{\alpha}\right), \quad (\text{A.7})$$

$$\lim_{q \rightarrow 1-0} \frac{\Gamma\left(\frac{\nu}{1-q} + 1\right)}{(1-q)^\alpha \Gamma\left(\frac{\nu}{1-q} + \alpha + 1\right)} = \nu^{-\alpha}, \quad (q < 1). \quad (\text{A.8})$$

As transformadas de Fourier das q -Gaussianas são expressas em termos das funções de Bessel e funções modificadas de Bessel (vide Ref. [85, Eq.s 3.384 9 e 3.387 2]):

$$\mathcal{F} \left\{ \left[e_q^{-ax^2} \right]^\nu ; y \right\} = \frac{2}{\sqrt{2(q-1)a} \Gamma\left(\frac{\nu}{q-1}\right)} \left(\frac{|y|}{2\sqrt{(q-1)a}} \right)^\mu K_\mu \left(\frac{|y|}{\sqrt{(q-1)a}} \right) \quad (1 < q < 1 + 2\nu), \quad (\text{A.9})$$

$$\mathcal{F} \left\{ \left[e_q^{-ax^2} \right]^\nu ; y \right\} = \frac{\Gamma\left(\frac{\nu}{1-q} + 1\right)}{\sqrt{2(1-q)a}} \left(\frac{2\sqrt{(1-q)a}}{y} \right)^{-\mu} J_{-\mu} \left(\frac{y}{\sqrt{(1-q)a}} \right) \quad (-\infty < q < 1), \quad (\text{A.10})$$

com

$$\mu = \frac{\nu}{q-1} - \frac{1}{2}. \quad (\text{A.11})$$

Em todos os casos, temos $a > 0$, $\nu > 0$ e, para $q < 1$, o corte é localizado em

$$x_c = \sqrt{\frac{1}{(1-q)a}}. \quad (\text{A.12})$$

Se considerarmos uma distribuição *normalizada* (seja $q > 1$ ou $q < 1$), é válida a seguinte relação entre os momentos de quarta e segunda ordem:

$$\frac{\langle x^4 \rangle}{3 \langle x^2 \rangle^2} = \frac{5-3q}{7-5q} \quad \left(q < \frac{7}{5} \right), \quad (\text{A.13})$$

tendo como caso particular a conhecida relação

$$\frac{\langle x^4 \rangle}{3 \langle x^2 \rangle^2} = 1. \quad (\text{A.14})$$

Apêndice B

Publicações

Partes desta Tese foram derivadas dos seguintes artigos (já publicados, aceitos, *e-prints* ou submetidos): eles foram modificados para colocá-los num contexto e formato adequados. São 15 trabalhos (Tabela B.1 e listagem seguinte, em ordem cronológica), 81 citações cadastradas pelo ISI - Institute for Scientific Information (opção “Full search, Cited Ref Search”, devidamente descontado um homônimo, em 28 de janeiro de 2004), 88 diferentes autores já citaram os artigos abaixo. Estes trabalhos correspondem à minha modesta retribuição e contribuição ao CBPF.

Tabela B.1: Publicações

Núm.	Ano	Citações [†]	Ref.
1	1998	23	[67]
2	1998	26	[11]
3	1999	7	[88]
4	1999	-	[3]
5	2002	4	[39]
6	2002	1	[180]
7	2002	6	[153]
9	2002	0	[216]
12	2002	0	[261]
8	2002	-	[178]
10	2003	2	[238]
11	2003	-	[239]
13	2003	-	[155]
14	2003	-	[77]
15	2003	-	[100]

[†]De acordo com o ISI, em 28/01/2004, opção “Easy Search”.

-: publicação não cadastrada no ISI.

1. E.P. Borges; *On a q -generalization of circular and hyperbolic functions*, J. Phys. A: Math. Gen. **31** 5281–5288 (1998) (Ref. [67]).
2. E.P. Borges e Itzhak Roditi; *A family of nonextensive entropies*, Phys. Lett. A **246** 399–402 (1998) (Ref. [11]).
3. E.K. Lenzi, E.P. Borges e R.S. Mendes; *A q -generalization of Laplace transforms*, J. Phys. A: Math. Gen. **32** 8551–8561 (1999) (Ref. [88]).
4. E.P. Borges; *Irreversibilidade, desordem e incerteza: três visões da generalização do conceito de entropia*, Rev. Bras. Ens. Fís. **21** (4) 453–463 (1999) (Ref. [3]).
5. C. Tsallis, E.P. Borges e F. Baldovin; *Mixing and equilibration: Protagonists in the scene of nonextensive statistical mechanics*, Physica A **305** (1-2), 1–18 (2002) (Ref. [39]).
Incluído na lista “Top 10 Most Downloaded Papers in Physica A during 2002” [<http://physics.elsevier.com/physics/nonlinear/mostdnld-physa.html>].
6. E.P. Borges e C. Tsallis; *Negative specific heat in a Lennard-Jones-like gas with long-range interactions*, Physica A **305** (1-2), 148–151 (2002) (Ref. [180]).
7. E.P. Borges, C. Tsallis, G.F.J. Añaños e P. M. C. de Oliveira; *Nonequilibrium Probabilistic Dynamics of the Logistic Map at the Edge of Chaos*, Phys. Rev. Lett. **89** (25) 254103 (2002) (Ref. [153]).
8. E.P. Borges, C. Tsallis, A. Giansanti, D. Moroni; *Dinâmica de um sistema não extensivo de rotores clássicos anisotrópicos acoplados*, Tânia Tomé (Ed.), Tendências da Física Estatística no Brasil — Escala e Complexidade (Editora Livraria da Física, São Paulo, 2003) pp. 84–87 (Ref. [178]).
9. E.P. Borges; *Comment on “The individual success of musicians, like that of physicists, follows a stretched exponential distribution” by J. A. Davies*, Eur. Phys. J. B **30** (4) 593–595 (2002) (Ref. [216]).
10. C. Tsallis, J.C. Anjos e E.P. Borges; *Fluxes of cosmic rays: a delicately balanced stationary state*, Phys. Lett. A **310**, (5–6) 372–376 (2003) (Ref. [238]).
11. C. Tsallis e E.P. Borges; *Nonextensive statistical mechanics – Applications to nuclear and high energy physics*, Proceedings of the X International Workshop on Multiparticle Production – Correlations and Fluctuations in QCD (8-15 June 2002, Crete), Ed. N. Antoniou (World Scientific, Singapore, 2003) pp. 326–343.
[também disponível em <http://arXiv.org/cond-mat/0301521>] (Ref. [239]).
12. E.P. Borges; *Empirical nonextensive laws for the county distribution of total personal income and gross domestic product*, Physica A **334**, 255–266 (2004) (Ref. [261]).

13. E.P. Borges e U. Tirnakli; *Mixing and relaxation dynamics of the Henon map at the edge of chaos*, Physica D (2004) (*in press*).
[<http://arXiv.org/abs/cond-mat/0302616>] (Ref. [155]).
14. E.P. Borges; *A possible deformed algebra and calculus inspired in nonextensive thermostatics*. [<http://arXiv.org/cond-mat/0304545>] (2003)
(Aceito para publicação em Physica A) (Ref. [77]).
15. E.P. Borges, C.Tsallis, J.G.V. Miranda, R.F.S. Andrade; *Mother wavelet functions generalized by q-exponentials*. Ainda não submetido para publicação (Ref. [100]).

Apêndice C

Apresentações

Ao longo do período de desenvolvimento da presente Tese, foram possíveis apresentações de partes de seu conteúdo em alguns eventos, listados a seguir:

1. XXI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Caxambu, MG, 2 a 6 de junho de 1998. Apresentação em painel do trabalho *Uma Generalização de Entropias da Física Não-Extensiva*, E.P.B. e I. Roditi.
2. Gordon Conference on Modern Developments in Thermodynamics, Barga, Itália, 18 a 23 de abril de 1999. Apresentação em painel do trabalho *A q-generalization of Laplace transforms*, E.K. Lenzi, E.P.B. e R.S. Mendes.
3. XXII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, São Lourenço, MG, 11 a 15 de maio de 1999. Apresentação oral, por C. Tsallis, do trabalho *Sistemas conservativos termalizados: alcance das forças e sensibilidade às condições iniciais*, C. Tsallis, L. Borland e E.P.B.
4. XXII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, São Lourenço, MG, 11 a 15 de maio de 1999. Apresentação em painel do trabalho *Uma generalização da transformada de Laplace*, E.K. Lenzi, E.P.B. e R.S. Mendes.
5. Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia, 6 de abril de 2001. Apresentação do Seminário *q-Deformação em mecânica estatística não extensiva e funções analíticas*.
6. International School and Workshop on Nonextensive Thermodynamics and Physical Applications, Villasimius (Cagliari), Itália, 23 a 30 de maio de 2001. Apresentação em painel do trabalho *Anomalies in a Lennard-Jones-like gas with long-range interactions*, E.P.B. e C. Tsallis.
7. International Workshop on Interdisciplinary Applications of Ideas from Nonextensive Statistical Mechanics and Thermodynamics, Santa Fe Institute, Santa Fe, New Mexico, EEUU, 8 a 12 de abril de 2002. Apresentação em painel do trabalho *Nonextensive thermodynamical approach for the county distribution of personal income*, E.P.B.

8. Simpósio de Mecânica Estatística, Tendências da Física Estatística no Brasil — Escala e Complexidade, em Homenagem aos 60 anos do Prof. S.R.A. Salinas. Campos do Jordão, São Paulo, 24 a 27 de novembro de 2002. Apresentação oral do trabalho *Dinâmica de um sistema não extensivo de rotores clássicos anisotrópicos acoplados*, E.P.B., C. Tsallis, A. Giansanti, D. Moroni.
9. XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Caxambu, MG, 6 a 10 de maio de 2003. Apresentação em painel (por R.F.S. Andrade) do trabalho *Transformadas de ondaletas baseadas em q -exponenciais: aplicação na análise multifractal de perfis e medidas*, E.P.B., J.G.V. Miranda, R.F.S. Andrade, C. Tsallis.
10. Second Sardinia's International Conference on News and Expectations in Thermostatistics, Villasimius (Cagliari), Itália, 21 a 28 de setembro de 2003. Apresentação dos trabalhos: 1) *Two-dimensional dissipative maps at the edge of chaos: Mixing and relaxation dynamics* (apresentação oral), E.P.B. e U. Tirnakli; 2) *A possible deformed algebra and calculus inspired in nonextensive thermostatistics* (apresentação em painel) E.P.B.
11. VIII Latin American Workshop on Nonlinear Phenomena, Salvador, Bahia, de 28 de setembro a 3 de outubro de 2003. Apresentação em painel do trabalho *Some examples of applications of nonextensive statistical mechanics to complex systems*, E.P.B.
12. International Workshop on Trends and Perspectives on Extensive and Nonextensive Statistical Mechanics, em Homenagem aos 60 anos do Prof. C. Tsallis. Angra dos Reis, Rio de Janeiro, de 19 a 21 de novembro de 2003. Apresentação em painel do trabalho *Empirical evidences of connections between nonextensive distributions and complex systems*, E.P.B.

Referências

- [1] R. Balian; *From Microphysics to Macrophysics*, (Springer-Verlag, Berlin, 1991).
- [2] P. Bak; *How Nature Works*, (Oxford University Press, Oxford, 1997).
- [3] E.P. Borges; Rev. Bras. Ens. Fis. **21** (4), 453 (1999).
- [4] A. Rényi; Proc. Fourth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability **1**, 547 (1960).
- [5] A. Rényi; *Probability Theory* (North-Holland, Amsterdam, 1970).
- [6] J. Havrda e F. Charvat; Kybernetika **3**, 30 (1967).
- [7] Z. Daróczy; Information and Control **16**, 36 (1970).
- [8] C. Tsallis; Chaos, Solitons and Fractals **6**, 539 (1995).
- [9] C. Tsallis; J. Stat. Phys. **52**, 479 (1988).
- [10] S. Abe; Phys. Lett. A **224**, 326 (1997).
- [11] E.P. Borges e I. Roditi; Phys. Lett. A **246**, 399 (1998).
- [12] R.S. Johal; Phys. Rev. E **58**, 4147 (1998).
- [13] A.R.R. Papa; J. Phys. A **31**, 5271 (1998).
- [14] F.H. Jackson; Mess. Math. **38**, 57 (1909).
- [15] F.H. Jackson; Quart. J. Pure Appl. Math. **41**, 193 (1910).
- [16] J.L. Lebowitz; Physics Today **46**, 32 (Sept. 1993).
- [17] A. Wehrl; Rev. Mod. Phys. **50**, 221 (1978).
- [18] A. Wehrl; Rep. Math. Phys. **30**, 119 (1991).
- [19] E.M.F. Curado, e C. Tsallis; J. Phys. A: Math. Gen. **24**, L69 (1991); Corrigenda **24**, 3187 (1991) e **25**, 1019 (1992).

- [20] C. Tsallis; *Extensive versus Nonextensive Physics*, in *New Trends in Magnetism, Magnetic Materials and Their Applications*, J.L. Morán-López e J.M. Sanchez, p. 451 (Plenum Press, New York, 1994).
- [21] C. Tsallis; *Physica A* **221**, 277 (1995).
- [22] C. Tsallis; *Braz. J. Phys.* **29**, 1 (1999).
- [23] M. Gell-Mann e C. Tsallis (Eds.); *Nonextensive Entropy – Interdisciplinary Applications* (Oxford University Press, Oxford, 2003).
- [24] C. Tsallis; *What should a statistical mechanics satisfy to reflect nature?*, a ser publicado em um volume especial de *Physica D*, intitulado *Anomalous Distributions, Nonlinear Dynamics and Nonextensivity*, Eds. H.L. Swinney e C. Tsallis (2004).
- [25] C. Tsallis; *Some thoughts on theoretical physics*, a ser publicado em um volume especial de *Physica A* [<http://arXiv.org/cond-mat/0312699>].
- [26] <http://tsallis.cat.cbpf.br/biblio.htm>
- [27] K. Huang; *Statistical Mechanics* (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1963).
- [28] A.M. Mariz; *Phys. Lett. A* **165**, 409 (1992).
- [29] J.D. Ramshaw; *Phys. Lett. A* **175**, 169 (1993).
- [30] C. Caratheódory; *Math. Ann.* **67**, 355 (1909).
- [31] L. Tisza; *Generalized Thermodynamics*, (The MIT Press, Cambridge, MA, 1966).
- [32] H.B. Callen; *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, 2nd Ed. (John Wiley & Sons, New York, 1985).
- [33] R.C. Tolman; *The Principles of Statistical Mechanics* (Oxford University Press, New York, 1950).
- [34] C. Tsallis, R.S. Mendes e A.R. Plastino; *Physica A* **261**, 534 (1998).
- [35] G.R. Gueberoff e G.A. Raggio; *J. Math. Phys* **37**, 1776 (1995).
- [36] G.R. Gueberoff, P.A. Pury e G.A. Raggio; *J. Math. Phys* **37**, 1790 (1995).
- [37] C. Tsallis, F. Baldovin, R. Cerbino e P. Pierobon; *Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics and Thermodynamics*. [<http://arXiv.org/cond-mat/0309093>].
- [38] S. Abe; *Phys. Lett. A* **271**, 74 (2000).
- [39] C. Tsallis, E.P. Borges e F. Baldovin; *Physica A* **305** (1–2), 1 (2002).

- [40] C. Beck e F. Schlögl; *Thermodynamics of chaotic systems*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [41] B. Brunhes; *La dégradation de l'énergie* (Camps Flammarion, Paris, 1909, reimpressão em 1991).
- [42] L. Brillouin; *Science and Information Theory*, 2nd Ed. (Academic Press, New York, 1962).
- [43] C. Tsallis, S.V.F. Levy, A.M.C. de Souza e R. Maynard; *Phys. Rev. Lett.*, **75**, 3589 (1995); **77**, 5442 (erratum) (1996).
- [44] D. Prato e C. Tsallis; *Phys. Rev. E* **60**, 2398 (1999).
- [45] C. Tsallis; *Phys. Lett. A* **195**, 329 (1994).
- [46] R.P. Feynman (editor: J. Robbins); *The Pleasure of Finding Things Out* (Perseus Books, Cambridge, MA, 1999). Publicação original: R.P. Feynman; *What do you care what other people think?: Further Adventures of a Curious Character* (WW Norton, 1988).
- [47] L.G. Moyano, F. Baldovin e C. Tsallis; *Zeroth principle of thermodynamics in aging quasistationary states, e-print* [<http://arXiv.org/cond-mat/0305091>].
- [48] A. Plastino e A.R. Plastino; *Phys. Lett. A* **226**, 257 (1997).
- [49] M. Chaichian e A. Demichev; *Introduction to Quantum Groups* (World Scientific, Singapore, 1996).
- [50] C. Gómez, M. Ruiz-Altaba e G. Sierra; *Quantum Groups in Two-Dimensional Physics* (Cambridge UP, Cambridge, 1996).
- [51] R. Chakrabarti e R. Jagannathan; *J. Phys. A: Math. Gen.* **24**, L711 (1991).
- [52] D.S. McAnally; *J. Math. Phys.* **36**, 546 (1995).
- [53] G. Kaniadakis, comunicação pessoal, durante o evento *Second Sardinia's International Conference on News and Expectations in Thermostatistics*, ocorrido em Villasimius (Cagliari), Itália, 21 a 28 de setembro de 2003, do qual ele foi um dos organizadores.
- [54] B.D. Sharma e I.J. Taneja; *Metrika*, **22**, 205 (1975).
- [55] L.J. Rogers; *Proc. London Math. Soc.* **25**, 318 (1894).
- [56] R. Floreanini e L. Vinet; *Lett. Math. Phys.* **22**, 45 (1991).
- [57] R. Floreanini e L. Vinet; *Ann. Phys.* **221**, 53 (1993).

- [58] L.C. Biedenharn; *J. Phys. A: Math. Gen.* **22**, L873 (1989).
- [59] A.J. MacFarlane; *J. Phys. A: Math. Gen.* **22**, 4581 (1989).
- [60] R. Floreanini e L. Vinet; *Phys. Lett. A* **180**, 393 (1993).
- [61] R. Floreanini, J. LeTourneux e L. Vinet; *J. Phys. A: Math. Gen.* **28**, L287 (1995).
- [62] N.M. Atakishiyev; *J. Phys. A: Math. Gen.* **29**, L223 (1996).
- [63] N.M. Atakishiyev; *J. Phys. A: Math. Gen.* **29**, 7177 (1996).
- [64] N.M. Atakishiyev e P. Feinsilver; *J. Phys. A: Math. Gen.* **29**, 1659 (1996).
- [65] C. Kassel; *Quantum Groups* (Springer-Verlag, New York, 1995).
- [66] C. Tsallis; *Quimica Nova* **17**, 468 (1994).
- [67] E.P. Borges; *J. Phys. A: Math. Gen.* **31**, 5281 (1998).
- [68] C. Tsallis; *Nonextensive statistical mechanics and thermodynamics: Historical background and present status, in Nonextensive Statistical Mechanics and Its Applications*, eds. S. Abe e Y. Okamoto, (Series Lecture Notes in Physics, Springer-Verlag, Heidelberg, 2001), p. 3.
- [69] J. Naudts; *Physica A* **316** (1-4), 323 (2002).
- [70] W.E. Boyce e R.C. DiPrima; *Elementary Differential Equations and Boundary Value Problems*, (John Wiley & Sons, 2nd Ed., New York, 1969).
- [71] E. Kreyszig; *Advanced Engineering Mathematics* (John Wiley & Sons, 7th Ed., New York, 1993).
- [72] M. Abramowitz e I.A. Stegun; *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1965).
- [73] <http://mathworld.wolfram.com/e.html>
- [74] H. Suyari; *q-Stirling's formula in Tsallis statistics, e-print*.
[<http://arXiv.org/cond-mat/0401541>] (2004).
- [75] G.A. Raggio; *J. Math. Phys* **36**, 4785 (1995).
- [76] A.K. Aringazin e M.I. Mazhitov; *Physica A* **325**, 409 (2003).
- [77] E.P. Borges; *A possible deformed algebra and calculus inspired in nonextensive thermostatics*,
[<http://arXiv.org/cond-mat/0304545>] (aceito para publicação em *Physica A*, 2004).

- [78] L. Nivanen, A. Le Méhauté e Q.A. Wang; *Generalized algebra within a nonextensive statistics*, e-print. [<http://arXiv.org/math-phys/0303061>] (2003).
- [79] L. Nivanen, A. Le Méhauté e Q.A. Wang; *Rep. Math. Phys.* **52**, 437 (2003).
- [80] E. Vives e A. Planes; *Phys. Rev. Lett.* **88**, 020601 (2002).
- [81] H. Suyari e M. Tsukada; *Law of Error in Tsallis Statistics*, e-print. [<http://arXiv.org/cond-mat/0401540>] (2004).
- [82] H. Suyari; *Mathematical structure derived from the q-multinomial coefficient in Tsallis statistics*, e-print. [<http://arXiv.org/cond-mat/0401546>] (2004).
- [83] G. Kaniadakis; *Phys. Lett. A* **288**, 283 (2001).
- [84] G. Kaniadakis; *Physica A* **296**, 405 (2001).
- [85] I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik, e A. Jeffrey (Editor); *Table of Integrals, Series, and Products*, 5th Edition (Academic Press, San Diego, 1994).
- [86] D. Prato; *Generalized statistical mechanics: Extension of the Hilhorst formula and applications to the classical ideal gas*, *Phys. Lett. A* **203**, 165 (1995).
- [87] E.K. Lenzi, R.S. Mendes e A.K. Rajagopal; *Phys. Rev. E* **59**, 1398 (1999).
- [88] E.K. Lenzi, E.P. Borges e R.S. Mendes; *J. Phys. A: Math. Gen.* **32**, 8551 (1999).
- [89] C. Tsallis e D. Prato; comunicação particular.
- [90] E. Butkov; *Física Matemática* (Editora Guanabara, Rio de Janeiro, 1988). Original: *Mathematical Physics* (Addison-Wesley Publishing Co., Reading, Massachusetts, 1968).
- [91] C. Tsallis; *Kinam/Revista de Física (Mexico)* **3**, 79 (1981).
- [92] C. Tsallis e A.C.N. de Magalhães; *Phys. Rep.* **268**, 305 (1996).
- [93] D. Prato; *Phys. Lett. A* **203**, 165 (1995).
- [94] A.R. Plastino, A. Plastino e C. Tsallis; *J. Phys. A: Math. Gen.* **27**, 5707 (1994).
- [95] A. Erdélyi (Editor); *Tables of Integral Transforms*, California Institute of Technology, Bateman Manuscript Project, vol. I (McGraw-Hill, New York, 1954).
- [96] R.K. Pathria; *Statistical Mechanics* (Pergamon Press, Oxford, 1972).
- [97] S. Abe e A.K. Rajagopal; *J. Phys. A* **33**, 8733 (2000).
- [98] R.V. Churchill; *Variáveis complexas e suas aplicações* (McGraw-Hill do Brasil, São Paulo, 1975).

- [99] M.S. Reis, V.S. Amaral, J.P. Araújo e I.S. Oliveira; *Phys. Rev. B* **68**, 014404 (2003).
- [100] E.P. Borges, C. Tsallis, J.G.V. Miranda e R.F.S. Andrade, *Mother wavelet functions generalized by q -exponentials*, pré-publicação (2003).
Resultados parciais foram apresentados em E.P. Borges, J.G.V. Miranda, R.F.S. Andrade e C. Tsallis; *Transformadas de ondaletas baseadas em q -exponenciais: aplicação na análise multifractal de perfis e medidas*. XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada 06 a 10 de maio de 2003 - Caxambu - MG (p. 129) (Apresentação de poster por Roberto S.F. Andrade)
[<http://www.sbf1.if.usp.br/eventos/enfmc/xxvi/programa/res0751.pdf>].
- [101] Y. Meyer; *Ondelettes* (Hermann, Éditeurs des sciences et des arts, Paris, 1990).
- [102] P.A. Morettin; *Ondas e Ondaletas: Da análise de Fourier à análise de ondaletas* (Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, 1999).
- [103] J. Gomes, L. Velho e S. Goldenstein; *Wavelets: teoria, software e aplicações*, 21^o Colóquio Brasileiro de Matemática, IMPA, Rio de Janeiro, 1997.
- [104] I. Daubechies; *Ten Lectures on Wavelets*, CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics, Vol. 61, (Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 1992).
- [105] T.H. Koornwinder (Ed.); *Wavelets: An Elementary Treatment of Theory and Applications* (World Scientific, Singapore, 1993).
- [106] G. Kaiser; *A Friendly Guide to Wavelets* (Birkhäuser, Boston, 1994).
- [107] J.J. Benedetto e M.W. Frazier; *Wavelets: Mathematics and Applications* (CRC Press, Boca Raton, 1994).
- [108] M. Holschneider; *Wavelets, An Analysis Tool* (Clarendon Press, Oxford, 1995).
- [109] B.B. Hubbard; *The world according to wavelets*, (A K Peters, Wellesley, MA, 1996).
- [110] E. Hernández e G. Weiss; *A First Course on Wavelets*, (CRC Press, Boca Raton, 1996).
- [111] L.G. Gamero, A. Plastino e M.E. Torres; *Physica A* **246**, 487 (1997).
- [112] A. Capurro, L. Diambra, D. Lorenzo, O. Macadar, M.T. Martin, C. Mostaccio, A. Plastino, E. Rofman, M.E. Torres e J. Velluti; *Physica A* **257**, 149 (1998).
- [113] A. Capurro, L. Diambra, D. Lorenzo, O. Macadar, M.T. Martins, C. Mostaccio, A. Plastino, J. Perez, E. Rofman, M.E. Torres e J. Velluti; *Physica A* **265**, 235 (1999).
- [114] M.T. Martin, A.R. Plastino e A. Plastino; *Physica A* **275**, 262 (2000).

- [115] J.H.Q. Celedon; *Máxima entropia aplicada a tomografia de tempos de trânsito*, Dissertação de Mestrado (Universidade Federal da Bahia, 1997).
- [116] S. Tong, A. Bezerianos, A. Malhotra, Y. Zhu e N. Thakor; *Phys. Lett. A* **314**, 354 (2003).
- [117] J. Fourier; *Théorie Analytique de la Chaleur* (1822) em *Œuvres de Fourier*, G. Darboux, Tome Premiere, (Gauthier-Villars et Fils, Paris, 1888).
- [118] Suplemento de Computing in Science & Engineering **1**, 6 (1999).
- [119] J.W. Cooley e J.W. Tukey; *Math. Comput.* **19**, 297 (1965).
- [120] C. Ray Wylie e L.C. Barrett; *Advanced Engineering Mathematics*, 5th Ed. (McGraw-Hill, Singapore, 1985).
- [121] D. Gabor; *J. Inst. Elect. Eng. (London)* **93**, No. III, 429 (1946).
- [122] I. Daubechies; *IEEE Trans. Inform. Theory* **36**, 961 (1990).
- [123] J. Morlet, G. Arens, I. Fourgeau e D. Giard; *Geophys.* **47**, 203 (1982).
- [124] A. Grossmann e J. Morlet; *SIAM J. Math. Anal.* **15**, 723 (1984).
- [125] A. Grossmann e J. Morlet; *Decomposition of functions into wavelets of constant shape and related transforms, in Mathematics and Physics, Lectures on Recent Results*, L. Streit (Ed.) (World Scientific, Singapore, 1985).
- [126] N.M. Temme; *Wavelets: First Steps, in Ref. [105]* p. 1 (1993).
- [127] P. Weil, U. D'Ambrósio e R. Crema; *Rumo à Nova Transdisciplinaridade — Sistemas abertos de conhecimento* (Summus Editorial, São Paulo, 1993).
- [128] M. Gell-Mann; *O Quark e o Jaguar — As aventuras no simples e no complexo* (Editora Rocco, Rio de Janeiro, 1996). Original: *The Quark and the Jaguar — Adventures in the simple and the complex* (1994).
- [129] D. Ruelle; *Chance and Chaos* (Princeton University Press, Princeton, 1991).
- [130] B.B. Mandelbrot; *The Fractal Geometry of Nature* (Freeman, San Francisco, 1983).
- [131] The Santa Fe Institute [<http://www.santafe.edu/>].
- [132] H.M. Nussenzveig; *Introdução à complexidade, in Complexidade e Caos*, H. Moysés Nussenzveig (organizador), (Editora UFRJ/COPEA, Rio de Janeiro, 1999).
- [133] R. Descartes; *Discurso do Método, para bem conduzir a própria razão e procurar a verdade nas ciências, in Descartes, Obra Escolhida* (Difusão Européia do Livro, São Paulo, 1973).

- [134] T.S. Kuhn; *A Estrutura das Revoluções Científicas* (Editora Perspectiva, São Paulo, 1995). Original: *The Structure of Scientific Revolutions* (The University of Chicago, 1970).
- [135] G. Parisi; *Complex Systems: a Physicist's Viewpoint*, e-print. [<http://arXiv.org/cond-mat/0205297>] (2002).
- [136] K. Mainzer; *Thinking in Complexity — The Complex Dynamics of Matter, Mind, and Mankind*, 3rd Ed., (Springer-Verlag, Berlin, 1997).
- [137] C. Tsallis; *Chaos, Solitons and Fractals* **13**, 371 (2002).
- [138] E.G.D. Cohen; *Physica A* **305**, 19 (2002).
- [139] M. Baranger; *Physica A* **305**, 27 (2002).
- [140] C. Tsallis; *Physica A* **302**, 187 (2001).
- [141] C. Tsallis, A.R. Plastino e W.-M. Zheng; *Chaos, Solitons and Fractals* **8**, 885 (1997).
- [142] Nietzsche; *A Gaia Ciência* (Ediouro, Rio de Janeiro, s/d) §233 (Original de 1887).
- [143] U.M.S. Costa, M.L. Lyra, A.R. Plastino e C. Tsallis; *Phys. Rev. E* **56**, 245 (1997).
- [144] M.L. Lyra e C. Tsallis; *Phys. Rev. Lett.* **80**, 53 (1998).
- [145] M.L. Lyra; *Weak Chaos: Power-law sensitivity to initial conditions and nonextensive thermostatistics*, in *Ann. Rev. Comp. Phys.*, Ed. D. Stauffer, p. 31 (World Scientific, Singapore, 1998).
- [146] C.R. da Silva, H.R. da Cruz e M.L. Lyra; *Braz. J. Phys.* **29** (1), 144 (1999).
- [147] V. Latora, M. Baranger, A. Rapisarda e C. Tsallis; *Phys. Lett. A* **273**, 97 (2000).
- [148] U. Tirnakli, G.F.J. Ananos e C. Tsallis; *Phys. Lett. A* **289**, 51 (2001).
- [149] F. Baldovin e A. Robledo; *Phys. Rev. E* **66**, 045104 (2002).
- [150] F. Baldovin e A. Robledo; *Europhys. Lett.* **60**, 066212 (2002).
- [151] F. Baldovin e A. Robledo; *Nonextensive Pesin identity. Exact renormalization group analytical results for the dynamics at the edge of chaos of the logistic map*, e-print [disponível em <http://arXiv.org/cond-mat/0304410>] (2003).
- [152] F.A.B.F. de Moura, U. Tirnakli e M.L. Lyra; *Phys. Rev. E* **62** (5), 6361 (2000).
- [153] E.P. Borges, C. Tsallis, G.F.J. Añaños e P.M.C. de Oliveira; *Phys. Rev. Lett.* **89** (25), 254103 (2003).
- [154] M. Henon; *Comm. Math. Phys.* **50**, 69 (1976).

- [155] E.P. Borges e U. Tirnakli; a ser publicado pela *Physica D* (2004)
[disponível em <http://arXiv.org/cond-mat/0302616>].
- [156] E.P. Borges e U. Tirnakli; *Two-dimensional dissipative maps at chaos threshold: Sensitivity to initial conditions and relaxation dynamics, e-print*
[disponível em <http://arXiv.org/cond-mat/0312683>] (2003).
- [157] U. Tirnakli; *Phys. Rev. E* **66**, 066212 (2002).
- [158] I. Bediaga, E.M.F. Curado e J.M. de Miranda; *Physica A* **286**, 156 (2000).
- [159] C. Beck; *Physica A* **286**, 164 (2000).
- [160] C. Beck, G.S. Lewis e H.L. Swinney; *Phys. Rev. E* **63**, 035303 (2001).
- [161] C. Beck; *Phys. Lett. A* **287**, 240 (2001).
- [162] T. Arimitsu e N. Arimitsu; *Phys. Rev. E* **61**, 3237 (2000).
- [163] T. Arimitsu e N. Arimitsu; *J. Phys. A* **33**, L235 (2000).
- [164] H.P. de Oliveira, I.D. Soares e E.V. Tonini; *Physica A* **295**, 348 (2001).
- [165] T.L. Hill; *Thermodynamics of Small Systems* (Dover, New York, 1994).
- [166] D.H.E. Gross; *Microcanonical thermodynamics: Phase transitions in "Small" systems*, Lecture Notes in Physics (World Scientific, Cingapura, 2001).
- [167] W. Thirring, H. Narnhofer e H.A. Posch; *Phys. Rev. Lett.* **91**, 130601 (2003).
- [168] P. Jund, S.G. Kim e C. Tsallis; *Phys. Rev. B* **52**, 50 (1995).
- [169] M. Antoni e S. Ruffo; *Phys. Rev. E* **52**, 2361 (1995).
- [170] C. Anteneodo e C. Tsallis; *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5313 (1998).
- [171] M. Antoni e Torcini; *Phys. Rev. E* **57**, R6233 (1998).
- [172] V. Latora, A. Rapisarda e S. Ruffo; *Phys. Rev. Lett.* **80**, 692 (1998).
- [173] F. Tamarit e C. Anteneodo; *Phys. Rev. Lett.* **84**, 208 (2000).
- [174] V. Latora, A. Rapisarda e C. Tsallis; *Phys. Rev. E* **64**, 056134 (2001).
- [175] V. Latora, A. Rapisarda e C. Tsallis; *Physica A* **305**, 129 (2002).
- [176] A. Campa, A. Giansanti e Daniele Moroni; *Physica A* **305**, 137 (2002).
- [177] F.D. Nobre e C. Tsallis; *Phys. Rev. E* **86**, 036151 (2003).

- [178] E.P. Borges, C. Tsallis, A. Giansanti, D. Moroni; *Dinâmica de um sistema não extensivo de rotores clássicos anisotrópicos acoplados*, Tânia Tomé (Ed.), *Tendências da Física Estatística no Brasil — Escala e Complexidade* (Editora Livraria da Física, São Paulo, 2003) pp. 84–87.
- [179] H. Yoshida; *Phys. Lett. A* **150**, (5,6,7) 262 (1990).
- [180] E.P. Borges e C. Tsallis; *Physica A* **305**, 148 (2002).
- [181] G. Mie; *Ann. Phys.* **11**, 657 (1903).
- [182] J. M. Prausnitz, R. N. Lichtenthaler e E. G. de Azevedo; *Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria*, 2nd Ed. (Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs, NJ, 1986).
- [183] J.E. Lennard-Jones; *Proc. Roy. Soc. A* **106**, 463 (1924).
- [184] F. London; *Trans. Faraday Soc.* **33**, 8 (1937).
- [185] S. Curilef e C. Tsallis; *Phys. Lett. A* **264**, 270 (1999).
- [186] C. Beck; *Physica A* **306**, 189 (2002).
- [187] F.M. Ramos, C. Rodrigues Neto e R.R. Rosa; *Intermittency and Nonextensivity in Turbulence and Financial Markets*, e-print [<http://arXiv.org/cond-mat/9907348>] (1999).
- [188] F.M. Ramos, C. Rodrigues Neto e R.R. Rosa; *Generalized Thermostatistical Description of Intermittency and Non-extensivity in Turbulence and Financial Markets*, e-print [<http://arXiv.org/cond-mat/0010435>] (2000).
- [189] C. Tsallis, G. Bemski e R.S. Mendes; *Phys. Lett. A* **257**, 93 (1999).
- [190] A. Upadhyaya, J.-P. Rieu, J. Glazier e Y. Sawada; *Physica A* **293**, 549 (2001).
- [191] M.A. Montemurro; *Physica A* **300**, 567 (2001).
- [192] S. Abe e N. Suzuki; *A law behind congestion of the Internet*, e-print [<http://arXiv.org/cond-mat/0204336>] (2002).
- [193] L.C. Malacarne, R.S. Mendes e E.K. Lenzi; *Phys. Rev. E* **65**, 017106 (2001).
- [194] L.C. Malacarne e R.S. Mendes; *Physica A* **286**, 391 (2000).
- [195] S. Redner; *Eur. Phys. J. B* **4**, 131 (1998).
- [196] C. Tsallis e M.P. de Albuquerque; *Eur. Phys. J. B* **13**, 777 (2000).
- [197] S. Picoli Jr., R.S. Mendes e L.C. Malacarne; *Physica A* **324**, 678 (2003).

- [198] A. Einstein; *Investigations on the theory of the Brownian movement*, (Dover Publications, New York, 1956). A Edição Dover é uma compilação de traduções para o inglês de uma série de artigos de Einstein publicados entre 1906 e 1908.
- [199] J. Gleick; *Caos, a Criação de uma Nova Ciência*, p. 81 (Editora Campus, Rio de Janeiro, 1990). Original: *Chaos – Making a New Science* (1987).
- [200] V. Pareto; *Cours d'Économie Politique* (Macmillan, London, 1897).
- [201] <http://cepa.newschool.edu/het/profiles/pareto.htm>.
- [202] B. Gutenberg e C.F. Richter; *Bull. Seismol. Soc. Am.* **34**, 185 (1944).
- [203] G.K. Zipf; *Human Behavior and The Principle of Least Effort — An Introduction to Human Ecology*, (Hafner Publishing Company, New York, 1972). Original de 1949.
- [204] R. Gibrat; *Les inégalités économiques*, (Sirey, Paris, 1931).
- [205] S. Denisov; *Phys. Lett. A* **235**, 447 (1997).
- [206] M. Planck; *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gessellschaft* **2**, 202 e 237 (1900); Tradução para o inglês por D. ter Haar e S.G. Brush; *Planck's Original Papers in Quantum Physics* (Taylor and Francis, London, 1972).
- [207] J. W. Cronin; *Rev. Mod. Phys.* **71**, S165 (1999).
- [208] C. Beck e E.D.G. Cohen; *Physica A* **322**, 267–275 (2003).
- [209] K. Christensen, L. Danon, T. Scanlon e P. Bak; *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **99**, 2509 (2002).
- [210] P. Bak, K. Christensen, L. Danon e T. Scanlon; *Phys. Rev. Lett* **88**, 178501 (2002).
- [211] Seth A. McGinnis; *On the Effects of Geometry in Discrete Element Numerical Earthquake Simulations*, Tese de doutoramento, Universidade do Colorado, 2001. Disponível em [<http://richter.colorado.edu/~sethmc/thesis/title.html>]. Sobre a lei de Gutenberg-Richter, vide [<http://richter.colorado.edu/~sethmc/thesis/node11.html>].
- [212] <http://simscience.org/crackling/Advanced/Earthquakes/GutenbergRichter.html>
- [213] P. Bak, K. Christensen, L. Danon e T. Scanlon; *Phys. Rev. Lett* **90**, 109901 (2002).
- [214] K. Christensen, L. Danon, T. Scanlon e P. Bak; *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **100**, 4352 (2003).
- [215] F. Omori; *J. Coll. Sci. Imp. Univ. Tokio* **7**, 111 (1894).
- [216] E.P. Borges; *Eur. Phys. J. B* **30**, 593 (2002).

- [217] S. Abe e N. Suzuki; *J. Geo. Res.* **108** (B2) Art. No. 2113 (2003).
- [218] S. Abe e N. Suzuki; *Time Interval Distribution of Earthquakes, e-print* [<http://arXiv.org/cond-mat/0207657>] (2002).
- [219] S. Abe e N. Suzuki; *Zipf-Mandelbrot Law for Time Intervals of Earthquakes, e-print* [<http://arXiv.org/cond-mat/0208344>] (2002).
- [220] S. Abe e N. Suzuki; *Small-world structure of earthquake network, e-print* [<http://arXiv.org/cond-mat/0308208>] (2003).
- [221] E. Kolb, T. Mazozi, E. Clément e J. Duran; *Eur. Phys. J. B* **8**, 483 (1999).
- [222] G. Ovarlez, E. Kolb e E. Clément; *Phys. Rev. E* **64**, 060302 (2001).
- [223] J.P.K. Doye; *Phys. Rev. Lett.* **88**, 238701 (2002).
- [224] A.-L. Barabási e R. Albert; *Science* **286**, 509 (1999).
- [225] R. Albert e A.-L. Barabási; *Phys. Rev. Lett.* **85**, 5234 (2000).
- [226] B. Sadoulet e J.W. Cronin; *Phys. Today* **44**, 53 (1991).
- [227] J.W. Cronin, T.K. Gaisser e S.P. Swordy; *Sci. Am.* **276**, 32 (1997).
- [228] C.M.G. Lattes e P.S. Occhialini; *Nature* **159**, 331 (1947).
- [229] C.M.G. Lattes, H. Muirhead, G.P.S. Occhialini e C.F. Powell; *Nature* **159**, 694 (1947).
- [230] C.M.G. Lattes, G.P.S. Occhialini e C.F. Powell; *Nature* **160**, 453, 486 (1947).
- [231] C.M.G. Lattes, G.P.S. Occhialini e C.F. Powell; *Nature* **160**, 486 (1947).
- [232] Ana Maria Ribeiro de Andrade; *Físicos, Mésons e Política: a dinâmica da ciência na sociedade* (Editora Hucitec e Museu de Astronomia e Ciências Afins, São Paulo, Rio de Janeiro, 1999).
- [233] César Lattes; *Descobrimdo a estrutura do universo* (Editora UNESP, São Paulo, 2000).
- [234] E. Fermi; *Phys. Rev.* **81**, 683 (1951).
- [235] R. Hagedorn; *N. Cim.* **3**, 147 (1965).
- [236] K. Greisen; *Phys. Rev. Lett.* **16**, 748 (1966).
- [237] G.T. Zatsepin e V.A. Kuzmin; *Sov. Phys. JETP Lett.* **4**, 78 (1966).
- [238] C. Tsallis, J.C. Anjos e E.P. Borges; *Phys. Lett. A* **310**, 372 (2003).

- [239] C. Tsallis e E.P. Borges; *Nonextensive statistical mechanics — Applications to nuclear and high energy physics*, in *Proceedings of the 10th International Workshop on Multiparticle Production – Correlations and Fluctuations in QCD*, p. 326, editores N.G. Antoniou, F.K. Diakonov e C.N. Ktorides (World Scientific, Singapore, 2003) [também disponível em <http://arXiv.org/cond-mat/0301521>].
- [240] L. Landau e E. Lifchitz; *Théorie du Champ* (Éditions de la Paix, Moscou, s.d.).
- [241] H. Goldstein; *Classical Mechanics*, 2nd Ed. (Addison-Wesley, Reading, 1980).
- [242] F. Reif; *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*, International Edition (McGraw-Hill, Singapore, 1985).
- [243] S.P. Swordy; <http://astroparticle.uchicago.edu/announce.htm>
- [244] C. Beck; *Physica A* **286**, 164 (2000).
- [245] C. Beck, *Physica D* **171**,72 (2002).
- [246] E.W. Kolb e M.S. Turner; *The Early Universe*, p. 73 (Addison-Wesley, New York, 1990).
- [247] A.A. Lagutin, Yu.A. Nikulin e V.V. Uchaikin; *Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.)* **97**, 267 (2001).
- [248] Kaskade Collaboration, J.R. Horandel et al.; *Nucl. Phys. (Proc. Suppl.)* **110**, 453 (2002) [também disponível em <http://arXiv.org/astro-ph/0201109>].
- [249] S.P. Swordy et al.; *The Composition of Cosmic Rays at the Knee*, e-print <http://arXiv.org/astro-ph/0202159> (2002).
- [250] C. Beck; *Physica A* **331**, 173 (2003).
- [251] G. Kaniadakis; *Phys. Rev. E* **66**, 056125 (2002).
- [252] F. Liljeros, C. R. Edling, L. A. N. Amaral, H. E. Stanley e Y. Åberg; *Nature* **411**, 907 (2001).
- [253] L. A. N. Amaral, A. Scala, M. Barthélémy, e H. E. Stanley; *Proc. Nat. Acad. Sci.* **97**, 11149 (2000).
- [254] R.N. Mantegna e H.E. Stanley; *An Introduction to Econophysics, Correlations and Complexity in Finance* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 2000).
- [255] N.A. Chriss; *Physics Today* **53**, (12) 70 (2000) [<http://www.physicstoday.org/pt/vol-53/iss-12/p70a.html>].
- [256] C.R. Shalizi; uma resenha originalmente escrita para *Quantitative Finance*, disponível em [<http://www.cscs.umich.edu/~crshalizi/reviews/intro-to-econophysics/>],

- [257] C. Tsallis, C. Anteneodo, L. Borland e R. Osorio; *Physica A* **324**, 89 (2003).
- [258] W. Souma; *Universal structure of the personal income distribution, e-print* (2000) [<http://arXiv.org/cond-mat/0011373>].
- [259] W. Souma; *Physics of personal income, e-print*. [<http://arXiv.org/cond-mat/0202388>] (2002).
- [260] A. Ishikawa, T. Suzuki e M. Tomoyose; *A new approach to personal income distribution, e-print* [<http://arXiv.org/cond-mat/0203399>] (2002).
- [261] E.P. Borges; *Physica A* **334**, 255 (2004).
- [262] Bureau of Economic Analysis [<http://www.bea.doc.gov>].
- [263] IPEA - Instituto de Pesquisa Econômica Aplicada [<http://www.ipea.gov.br/pub/PIBsMu/pibs.htm>].
- [264] Federal Statistical Office Germany [<http://www.destatis.de/basis/e/vgr/vgrtxt.htm>].
- [265] Office for National Statistics [<http://www.statistics.gov.uk/themes/economy/Articles/regionalaccounts.asp>].
- [266] J. Laherrère e D. Sornette; *Eur. Phys. J. B* **2**, 525 (1998).
- [267] Z.-F. Huang, S. Solomon, *Physica A* **306**, 412 (2002).
- [268] The World Bank Group [<http://devdata.worldbank.org/data-query/>].
- [269] Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística [<http://www.ibge.gov.br/home/default.php>].
- [270] T. Kaizoji; *Physica A* **326**, 256 (2003).
- [271] M.E.J. Newman; *Social Networks* **25**, 83 (2003).
- [272] M.E.J. Newman; *Phys. Rev. E* **64**, 016131 (2001).
- [273] M.E.J. Newman; *Phys. Rev. E* **64**, 016132 (2001).
- [274] M.E.J. Newman; *Random graphs as models of networks*, Santa Fe Institute pre-print 02-02-005, a ser publicado em *Handbook of Graphs and Networks*, eds.: S. Bornholdt e H.G. Schuster (Wiley-VCH, Berlin 2002).
- [275] J.A. Davies; *Eur. Phys. J. B* **27**, 445 (2002).
- [276] Guinness British Hit Singles, 13th Ed. (Guinness Publications, 2000).

- [277] Institute for Scientific Information, ISI Web of Knowledge, <http://isi3.newisiknowledge.com/>
- [278] A. Cho; *Science* **297**, 1268 (2002).
- [279] R. Luzzi, A.R. Vasconcelos e J.G. Ramos; *Science* **298**, 1171 (2002).
- [280] R.V. Chamberlin; *Science* **298**, 1172 (2002).
- [281] S. Abe e A.K. Rajagopal; *Science* **300**, 249 (2003).
- [282] A. Plastino; *Science* **300**, 250 (2003).
- [283] V. Latora, A. Rapisarda e A. Robledo; *Science* **300**, 250 (2003).
- [284] A. Plastino; Palestras convidadas no *VIII Latin American Workshop on Nonlinear Phenomena*, Salvador, Bahia, 28 de Setembro a 3 Outubro de 2003, e no *International Workshop on: Trends and Perspectives on Extensive and Non-Extensive Statistical Mechanics*, Angra dos Reis, Rio de Janeiro, 19 a 21 de novembro de 2003.
- [285] C. Tsallis, em entrevista a C. Pessoa e C. Fiolhais; *Gazeta de Física*, **25** (3) (2002) (uma publicação da Sociedade Portuguesa de Física) [http://nautilus.fis.uc.pt/gazeta/revistas/25_3/Entrevista.pdf].
- [286] K.R. Popper; *A lógica da pesquisa científica* (Cultrix, São Paulo, 1985). Original de 1934.
- [287] A. Einstein; *Annalen der Physik* **33**, 1275 (1910) [Tradução para o inglês: A. Pais, *Subtle is the Lord...* (Oxford University Press, 1982)].
- [288] E. Fermi; *Thermodynamics* (Dover, New York 1956, publicação original pela Prentice-Hall, 1937).
- [289] P.T. Landsberg; *Thermodynamics and Statistical Mechanics* (Oxford University Press, Oxford, 1978; também Dover, 1990).
- [290] P.A.M. Dirac; *Sci. Am.* **208** (5), 45 (1963).

**“MANIFESTAÇÕES DINÂMICAS E
TERMODINÂMICAS DE
SISTEMAS NÃO-EXTENSIVOS”**

Ernesto Pinheiro Borges

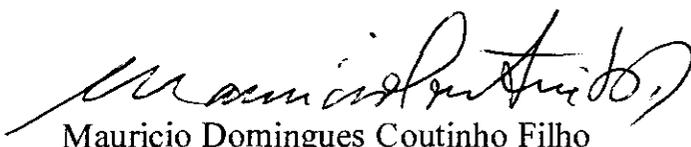
Tese de Doutorado apresentada no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, do Ministério da Ciência e Tecnologia, fazendo parte da banca examinadora os seguintes professores:



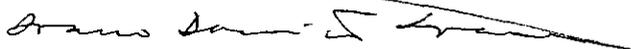
Constantino Tsallis – Presidente/Orientador



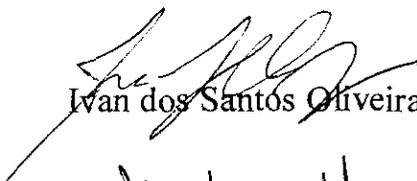
Belita Koiller



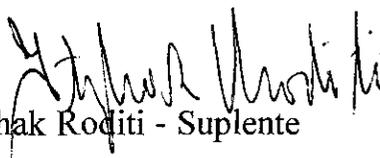
Mauricio Domingues Coutinho Filho



Ívano Damião Soares



Ivan dos Santos Oliveira Junior



Itzhak Roditi - Suplente

Rio de Janeiro, 28 de janeiro de 2004