

TESE DE DOUTORADO

**Sobre os fundamentos dinâmicos
da mecânica estatística não-extensiva**

Fulvio Baldovin

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas,
Rio de Janeiro, 2004

Sobre os fundamentos dinâmicos
da mecânica estatística não-extensiva

Tese de doutorado submetida ao
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas
sob orientação do Professor Dr. Constantino Tsallis
para a obtenção do título de
Doutor em Física por Fulvio Baldovin

Rio de Janeiro, Março de 2004

A Adriana Trevisiol e Antonio Baldovin

A Marisa Zamberlan

A Luca e Francesco Baldovin

*... senza uno qualsiasi di loro
questo lavoro non sarebbe stato possibile*

Agradecimentos

O primeiro agradecimento é para Marisa Zamberlan, para o essencial e infatigável apoio e carinho, e a infinita paciência ao longo destes maravilhosos anos. Logo em seguida agradeço a Luca e Francesco simplesmente pela preciosa presença que nos dá sentido no dia a dia. Uma lembrança cheia de saudade para minha mãe Adriana cujo exemplo, junto com o do meu pai Antonio, me deu a força de crer nos pequenos grandes feitos do dia a dia, que nos levam, aos poucos, a entender a beleza da natureza. Um abraço a Katia e Valerio, que foram sempre muitos próximos, apesar da distância geográfica.

Quero logo destacar meu agradecimento para Constantino Tsallis, que considero como um “pai científico” por ter-me ensinado o trabalho de pesquisador e ter-me introduzido à comunidade científica. Ele acompanhou constantemente os meus trabalhos e foi também um amigo para compartilhar as “sextas-feiras” e os acontecimentos da vida.

Cientificamente e pessoalmente tenho também uma preciosa dívida com Alberto Ro-bledo, que conheci em ocasião de uma visita dele ao CBPF e que desde então se tornou uma referência importante para os meus trabalhos.

Parte dos trabalhos aproveitaram da inestimável inspiração de discussões e palestras do maravilhoso grupo de Catania, entre outros A. Rapisarda, V. Latora e A. Pluchino, como também de E.G.D. Cohen, U. Tirnakli e S. Ruffo, que tive a sorte de encontrar durante congressos.

Quero agradecer o próprio CBPF para a minha formação científica. Fico particularmente grato a M. Novello, S.E. Bergliaffa e J.A. Helayël-Neto, que tiveram um papel importante na minha iniciação científica, a B. Schulze que me abriu ao mundo da com-

putação científica, e aos membros do grupo de mecânica estatística E.M.F. Curado, C.B. Anteneodo, F.D. Nobre M.A. Rego-Monteiro, A. Magalhães, pelas importantes e estimulantes discussões. Destaco também o carinho e a sempre disponível ajuda de Luzia, Vanda, Myriam e Almério.

Agradeço a turma toda de colegas doutorandos, destacando os nomes de L.G. Moyano, N.M. de Oliveira-Neto, J. de Souza, S.D. Queirós, G.F.J. Añanos, E. Brigatti e E. Borges pelas discussões científicas, a alegria no dia a dia, e também pelas maravilhosas comemorações no “bar do sujinho”.

Um agradecimento especial para J. de Souza, M. Zamberlan e S.D. Queirós pela ajuda nas correções do texto em português. Os erros que sobraram foram certamente em seções que não houve tempo para submeter a eles.

Agradeço as agências financiadoras CAPES e FAPERJ pelo apoio a este projeto.

Uma querida lembrança para as ONGs MLAL de Verona e CAPINA do Rio de Janeiro, que possibilitaram a minha vinda ao Brasil e que me introduziram ao amor para este grande país.

Um grande abraço, cheio de gratidão, para este maravilhoso País e para os seus habitantes que nos acolheram, ensinaram e doaram muito.

Resumo

Analizamos conexões entre dinâmica não-linear e mecânica estatística, focando a atenção sobre sistemas paradigmáticos que exibem um comportamento espaço-temporal complexo. Para comportamentos dinâmicos usuais reproduzimos resultados conhecidos ou esperados dentro do formalismo tradicional de Boltzmann-Gibbs (BG), para várias classes de casos anômalos, tipicamente caracterizadas por uma ocupação (multi)fractal do espaço de fases disponível, a generalização não-extensiva do formalismo de BG surge como um forte candidato para a descrição macroscópica do sistema. Começando com mapas unimodais (dissipativos) do tipo logístico, incrementamos depois a dimensão do espaço de fases em direção de sistemas reais macroscópicos, passando a estudar mapas simpléticos (Hamiltonianos) de baixa e alta dimensão e finalmente sistemas Hamiltonianos de muito corpos, ambos com interações de curto e de longo alcance. As nossas abordagens incluem resultados numéricos e analíticos (exatos), e seguem ao longo de três linhas principais: (i) o estudo da sensibilidade às condições iniciais e da produção de entropia em configurações inicialmente fora do equilíbrio; (ii) a análise do surgimento de estados quase-estacionários (meta-estáveis) que depois de um certo tempo fazem um *crossover* para o regime de BG; (iii) O estudo da fundamentação dinâmica do *ensemble* canônico. Em seguida resumimos os resultados principais.

- Utilizando a transformação de grupo de renormalização de Feigenbaum-Coulet-Tresser calculamos exatamente a dinâmica e a sensibilidade às condições iniciais para mapas unimodais com não-linearidade $\zeta > 1$ nas bifurcações de forquilha e tangente. Estas funções têm a forma de q -exponenciais como proposto na generalização não-

extensiva da mecânica estatística. Determinamos os parâmetros q que caracterizam estas classes de universalidade e calculamos explicitamente o coeficiente de Lyapunov generalizado λ_q ;

- Resolvemos a dinâmica no limiar do caos μ_∞ do mapa logístico e encontramos que é composta por trajetórias interligadas do tipo lei de potência que reproduzem a inteira cascata de duplicação de período que ocorre para $\mu < \mu_\infty$. Corroboramos esta estrutura analiticamente através do grupo de renormalização de Feigenbaum-Coulet-Tresser e encontramos que a sensibilidade às condições iniciais tem exatamente a forma de uma q -exponencial. Determinamos o parâmetro q e o coeficiente de Lyapunov generalizado λ_q . Provamos analiticamente a igualdade entre o coeficiente de Lyapunov generalizado λ_q e a taxa de produção de entropia K_q dada pela mecânica estatística não-extensiva. Os nossos resultados demonstram a validade da igualdade de Pesin q -generalizada em pontos críticos de mapas não-lineares unidimensionais e constituem uma inconfundível confirmação da aplicabilidade da generalização não-extensiva do formalismo de BG para pontos críticos de mapas não-lineares.
- Investigamos a sensibilidade às condições iniciais e a produção de entropia para dois paradigmáticos sistemas Hamiltonianos conservativos, o mapa *standard* e dois mapas *standard* acoplados simplecticamente, para vários valores dos parâmetros de controle. Quando o espaço de fases é suficientemente caótico, reproduzimos resultados anteriores obtidos dentro do contexto de BG. Para valores dos parâmetros de controle na região próxima à regularidade, quando o espaço de fases se torna uma complexa estrutura de tipo fractal com coexistência de regiões caóticas e regulares, surge um regime anômalo. Caracterizamos este regime anômalo utilizando a generalização não-extensiva do formalismo de BG. Neste contexto, analisamos a relação entre a sensibilidade às condições iniciais a lei de potência e a produção de entropia.
- Estudamos uma simples conexão entre resultados da teoria de dinâmica Hamiltoniana não-linear e termo-estatística. Usando uma apropriada definição para a tempe-

ratura dinâmica em mapas simpléticos acoplados globalmente, mostramos e caracterizamos estados quase-estacionários de longa duração que finalmente sofrem um *crossover* para um regime do tipo BG. Durante a evolução temporal, as propriedades geométricas (por exemplo a dimensão fractal) do espaço de fases mudam bastante, e a duração do regime anômalo diverge quando a caoticidade decresce.

- Implementamos um cálculo numérico geral que permite uma direta comparação entre dinâmica Hamiltoniana não-linear e a distribuição canônica de BG no espaço- Γ . Usando modelos paradigmáticos com interação de primeiros vizinhos, o ferromagneto XY inercial e o modelo β de Fermi-Pasta-Ulam, obtemos resultados de alta precisão que exibem a fundamentação dinâmica da mecânica estatística de BG. Mais especificamente, mostramos que a distribuição de BG pode ser obtida usando exclusivamente a segunda lei de Newton ($\mathbf{F} = m\mathbf{a}$). Discutimos a ergodicidade e observamos que o coeficiente de Lyapunov não representa uma medida consistente da relaxação envolvida com a ergodicidade. Quando o mesmo cálculo é implementado para analisar as propriedades de equilíbrio do modelo Hamiltoniano de muitos corpos com interação de longo alcance conhecido como modelo Hamiltoniano de campo médio, encontramos um acordo qualitativo com a teoria de BG. Em contraste, a teoria de BG não consegue em reproduzir a distribuição de energia obtida dinamicamente em correspondência do surgimento de um estado quase-estacionário do tipo vítreo. Comentamos sobre a possibilidade de confirmar *a priori* a construção teórica para uma possível descrição mecânico-estatística generalizada pela descrição deste estado meta-estável.
- Mostramos que o princípio zero da termodinâmica se aplica para estados quase-estacionários de tipo vítreo de sistemas Hamiltonianos de muitos corpos com interação de longo alcance. Discutimos também a mensurabilidade da temperatura para estes estados fora do equilíbrio utilizando um termômetro de *curto alcance*. Como foram estabelecidas muitas conexões entre estes estados quase-estacionários e a mecânica estatística não-extensiva, os nossos resultados são uma primeira evidência que estes conceitos básicos podem aplicar-se para este tipo de sistemas.

Abstract

We address connections between (nonlinear) dynamics and statistical mechanics, focusing on paradigmatic systems that display (spatio-temporal) complex behaviors. While within normal dynamical behavior we reproduce known or expected links with the usual Boltzmann-Gibbs (BG) formalism, for various classes of anomalous cases, typically characterized by a (multi)fractal occupation of the available phase space, the nonextensive generalization of BG formalism emerges as a strong candidate for the macroscopic description of the system. Starting with unimodal (dissipative) logistic-like maps, we increase the phase space dimension of our models towards real macroscopic systems, studying low- and high-dimensional symplectic (Hamiltonian) maps, and finally many-body continuous-time Hamiltonian systems, both with short-range and long-range interactions. Our findings include numerical and analytical (exact) results, and follow along three mainstreams: (i) The study of the sensitivity to initial conditions and of the entropy production in initially out-of-equilibrium configurations; (ii) The analysis of the emergence of quasistationary (metastable) states that after some time cross over to the BG regime; (iii) The study of the dynamical foundation of the canonical ensemble. Below, we summarize our main results:

- Using the Feigenbaum-Coulet-Tresser renormalization group transformation we work out exactly the dynamics and the sensitivity to initial conditions for unimodal maps of nonlinearity $\zeta > 1$ at both their pitchfork and tangent bifurcations. These functions have the form of q -exponentials as proposed in the nonextensive generalization of statistical mechanics. We determine the q -indices that characterize these universality classes and perform the calculation of the generalized Lyapunov exponent λ_q ;

- We uncover the dynamics at the chaos threshold μ_∞ of the logistic map and find it consists of trajectories made of intertwined power laws that reproduce the entire period-doubling cascade that occurs for $\mu < \mu_\infty$. We corroborate this structure analytically via the Feigenbaum-Coulet-Tresser renormalization group transformation and find that the sensitivity to initial conditions has precisely the form of a q -exponential, of which we determine the q -index and the generalized Lyapunov exponent λ_q . We prove analytically the equality between the generalized Lyapunov coefficient λ_q and the rate of entropy production K_q given by the nonextensive statistical mechanics. Our results advocate the validity of the q -generalized Pesin identity at critical points of one-dimensional nonlinear dissipative maps and are an unequivocal validation of the applicability of the nonextensive generalization of the BG formalism to critical points of nonlinear maps.
- We investigate the sensitivity to initial conditions and the entropy production for two paradigmatic conservative Hamiltonian dynamical systems, the standard map and two symplectically-coupled standard maps, for different values of their controlling parameters. When the phase space is sufficiently 'chaotic', we reproduce previous results obtained within the BG context. For values of the controlling parameters in the region close to regularity, when the phase space becomes an intricate (fractal-like) structure with the coexistence of chaotic and regular regions, an anomalous regime emerges. We characterize this anomalous regime using the nonextensive generalization of the BG formalism. Within this context, we analyze the relation between the power-law sensitivity to initial conditions and the entropy production.
- We address a simple connection between results of Hamiltonian nonlinear dynamical theory and thermostatistics. Using a properly defined dynamical temperature in globally coupled symplectic maps, we display and characterize long-standing quasi-stationary states that eventually cross over to a BG-like regime. As time evolves, the geometrical properties (e.g., fractal dimension) of the phase space change sensibly, and the duration of the anomalous regime diverges with decreasing chaoticity.

-
- We implement a general numerical calculation that allows for a direct comparison between nonlinear Hamiltonian dynamics and the BG canonical distribution in Γ -space. Using paradigmatic first-neighbor models, the inertial XY ferromagnet and the Fermi-Pasta-Ulam β -model, we obtain high-precision results that exhibit the dynamical foundation of statistical mechanics. More specifically, we show that the BG distribution can be obtained by using exclusively Newton second law ($\mathbf{F} = m\mathbf{a}$). We discuss ergodicity and we observe that the Lyapunov coefficient fails to represent a consistent measure of the relaxation involved with ergodicity. When the same calculation is implemented for the analysis of the equilibrium properties of the *long-range*-interacting N -body Hamiltonian system known as the Hamiltonian Mean Field model, we find a qualitative agreement between dynamics and the analytical predictions of BG theory. In contrast, the BG theory fails to reproduce the dynamical-produced distribution in correspondence of the emergence of a glassy-like quasistationary state. We argue about the possibility of confirming *a priori* the theoretical construction for a possible generalized statistical mechanical description of such a metastable state.
 - We show that the zeroth principle of thermodynamics applies to glassy-like quasistationary states of long-range interacting N -body Hamiltonian systems. We also discuss the measurability of the temperature in these out-of-equilibrium states using a *short-range* interacting thermometer. As many connections are already established between such quasistationary states and nonextensive statistical mechanics, our results are a first evidence that such basic concepts may apply to systems that the nonextensive formalism aims to describe.

Conteúdo

1	Introdução: Formalismo não-extensivo e questões fundamentais	1
1.1	Motivação física	1
1.2	Generalização da entropia: a origem do nome	4
1.2.1	Fundamentos matemáticos elementares	6
1.2.2	A entropia não-extensiva pode se tornar extensiva	9
1.2.3	Algumas propriedades da entropia não-extensiva	11
1.2.4	Outras possíveis generalizações da entropia de Boltzmann-Gibbs	13
1.3	Conexão com a termodinâmica	14
1.3.1	O formalismo canônico	14
1.3.2	A estrutura de Legendre	16
1.4	Super-estatística	19
1.5	Determinação dinâmica do parâmetro q	22
1.5.1	Sensibilidade às condições iniciais	23
1.5.2	Produção de entropia	25
1.5.3	Fundamentação dinâmica do ensemble canônico e platôs quase-estacionários	28
2	Sistemas dissipativos: mapas tipo logístico	29
2.1	Mapas de tipo logístico: um paradigma para o caos	30
2.1.1	Evidências experimentais dos mecanismos de rotas para o caos	34
2.1.2	Paralelismo entre duplicação de período e transições de fases	35

2.2	Bifurcações de forquilha e tangente	36
2.3	O limiar do caos	46
2.4	Platôs quase-estacionários no mapa logístico	57
3	Sistemas conservativos I: mapas simpléticos	62
3.1	Mapas simpléticos e teoria KAM	62
3.1.1	Mapas simpléticos: o mapa standard	64
3.2	Sensibilidade às condições iniciais e produção de entropia	73
3.2.1	Caso 2-dimensional: Sensibilidade às condições iniciais	73
3.2.2	Caso 2-dimensional: Produção de entropia	75
3.2.3	Caso 4-dimensional: Sensibilidade às condições iniciais	78
3.2.4	Caso 4-dimensional: Produção de entropia	81
3.2.5	Discussão	85
3.3	Platôs quase-estacionários em mapas simpléticos	90
3.3.1	Médias de ensemble	90
3.3.2	Médias temporais	101
4	Sistemas conservativos II: Hamiltonianos de muitos corpos	107
4.1	Fundamentação dinâmica do ensemble canônico de Boltzmann-Gibbs	108
4.2	Platôs quase-estacionários em sistemas de longo alcance	118
4.2.1	Anomalias dinâmicas e relações com o formalismo não-extensivo	119
4.2.2	Princípio zero da termodinâmica nos platôs quase-estacionários	132
4.2.3	Derivação dinâmica de ensemble canônico para o modelo Hamiltoniano de campo médio	142
5	Conclusões	150
5.1	Sensibilidade às condições iniciais e produção de entropia	151
5.1.1	Mapas unimodais	151
5.1.2	Mapas simpléticos	154
5.2	Surgimento de platôs quase-estacionários	156

5.2.1	Mapas unimodais	156
5.2.2	Mapas simpléticos	157
5.2.3	Sistemas Hamiltonianos de muitos corpos	158
5.2.4	Discussão	159
5.3	Derivação dinâmica do ensemble canônico	161
A	Solução canônica de BG do modelo XY inercial unidimensional	163
A.1	Primeiros vizinhos em $d = 1$	163
A.2	Alcance infinito	165
B	Solução canônica de BG do modelo β de Fermi-Pasta-Ulam	169

Capítulo 1

Introdução: Formalismo não-extensivo e questões fundamentais

Neste capítulo assumimos que a existência de fenômenos dinâmicos complexos, tais como o surgimento de estados estacionários fora do equilíbrio, leva à exigência de uma generalização da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs (BG). Esta hipótese será discutida e exemplificada nos capítulos seguintes. Veremos portanto, de um ponto de vista matemático, quais são as bases da generalização não-extensiva do formalismo tradicional. Abordaremos também questões fundamentais, algumas ainda abertas, ligadas à confirmação *física* do formalismo para sistemas Hamiltonianos de muitos corpos com interações de longo alcance.

1.1 Motivação física

Um conjunto de condições macroscópicas sobre um sistema físico impõem restrições à dinâmica do sistema. Por exemplo, fixar a energia total de um sistema conservativo corresponde a selecionar uma determinada região do espaço de fases do sistema, ou seja, a hipersuperfície caracterizada pelo valor da energia. A mecânica estatística de equilíbrio de

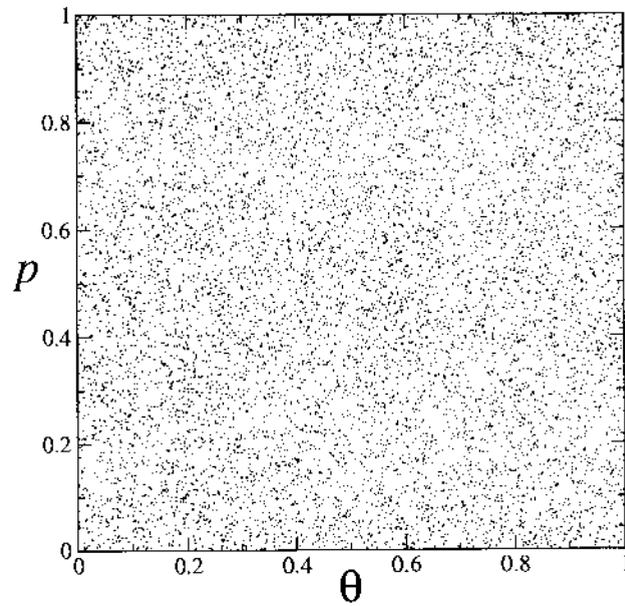


Figura 1.1: Caos no espaço de fases do mapa *standard* para $a = 7$ (veja a seção 3.1.1). Os pontos preto representam uma única órbita que começa em $(\theta(0), p(0)) = (0, 0.7)$, observada para o intervalo de tempo $0 \leq t \leq 1 \times 10^4$.

BG é essencialmente baseada no postulado de “equiprobabilidade a priori”, que diz [1]:

Quando um sistema macroscópico fechado está em equilíbrio termodinâmico, o estado microscópico em que o sistema se encontra é igualmente provável entre todos os estados dinamicamente acessíveis.

Como já observado pelos próprios fundadores da mecânica estatística (entre eles o próprio Einstein [2]) e mais recentemente por vários autores (veja, por exemplo, [1, 3, 4, 5, 6] e referências lá contidas) a questão da fundamentação dinâmica da teoria é um ponto muito delicado que ainda apresenta aspectos não completamente entendidos. Por outro lado, é um resultado bastante notável o fato que o formalismo de BG, inicialmente pensado para descrever sistemas Hamiltonianos contínuos conservativos, encontre aplicações fundamentais em toda a área de sistemas dinâmicos não-lineares (veja, por exemplo, [7, 8, 9]).

Existem porém vários sistemas físicos que exibem dinâmicas anômalas e complexas¹. Por exemplo, a teoria de sistemas dinâmicos não-lineares fornece inúmeras situações onde o comportamento das trajetórias não corresponde ao postulado de equiprobabilidade a priori. Um caso interessante, já que permite uma *visualização* do espaço de fases do sistema, é dado pelos mapas (*aplicações*) Hamiltonianos de baixa dimensão governados pelo teorema de Kolmogorov-Arnold-Moser (veja a seção 3.1). Estes mapas são controlados por um ou mais parâmetros que definem o nível de caoticidade do sistema. Nas Figs. 1.1 e 1.2 apresentamos, a título ilustrativo, o caso do mapa *standard*, discutido em detalhes na seção 3.1.1, cujo espaço de fases é o quadrado unitário $[0, 1) \times [0, 1)$. Quando o parâmetro de controle é configurado para valores que correspondem a grande caoticidade, uma única órbita cobre rapidamente de modo uniforme o espaço de fases (Fig. 1.1). Existem porém situações em que uma órbita percorre hierarquias de estruturas fractais (Fig. 1.2), em aberto contraste com o assumido pelo postulado de equiprobabilidade a priori. De modo geral, sistemas complexos, sejam eles conservativos ou dissipativos, apresentam situações dinâmicas que

¹É oportuno mencionar que os meus primeiros passos científicos, na área da cosmologia, foram dedicados justamente ao estudo de dinâmicas anômalas, no caso a possibilidade de trajetórias tipo *worm-holes* para fótons [10].

violam o postulado. Na tentativa de propor uma abordagem estatística destes sistemas, deve-se portanto enfrentar a questão da validade do postulado de equi-probabilidade a priori. De um lado, como veremos, podem existir situações que violam o postulado de forma *fraca*. Este é por exemplo o caso em que existe um subconjunto de medida não nula de regiões inacessíveis por determinadas órbitas, mas o espaço de fases preserva uma estrutura suficientemente regular para que as grandezas macroscópicas, medidas tipicamente através de projeções sobre os graus de liberdades relevantes, continuem satisfazendo o formalismo de BG. Do outro lado, em presença de uma violação forte do postulado, devem ser procuradas *generalizações* da teoria tradicional. Ao longo desta segunda linha foi proposta nos últimos anos [11] uma generalização do formalismo de BG, generalização esta que teve um notável sucesso na abordagem de fenômenos tais como fluidos turbulentos [12, 13, 14], colisões de alta energia [15], caos clássico [16, 17, 18] e quântico [19], sistemas estelares auto-gravitantes [20], sistemas granulares [21], sistemas financeiros [22], movimento de micro-organismos [23], e outros, e que passou a ser conhecida como *mecânica estatística não-extensiva*.

A generalização da estatística de BG é feita através da introdução de uma nova forma funcional para a entropia, que depende de um parâmetro real $q \in \mathbb{R}$. No limite $q \rightarrow 1$ o formalismo não-extensivo coincide com o formalismo tradicional. Esta tese visa estudar os fundamentos dinâmicos da estatística não-extensiva, exemplificando modelos dinâmicos que apresentam situações de violação do postulado de equi-probabilidade a priori e tentando abordar, onde for possível, a questão básica da determinação *a priori* do parâmetro q .

1.2 Generalização da entropia: a origem do nome

O conceito de entropia é formulado termodinamicamente por Clausius no século XIX, e graças as contribuições de Boltzmann e Gibbs ela se torna uma ferramenta fundamental da nova disciplina, por eles introduzida, da mecânica estatística. Eles associaram a idéia termodinâmica de entropia com um funcional do jogo de probabilidade do sistema. Von Neumann estendeu estas idéias para a mecânica quântica definindo a entropia S como

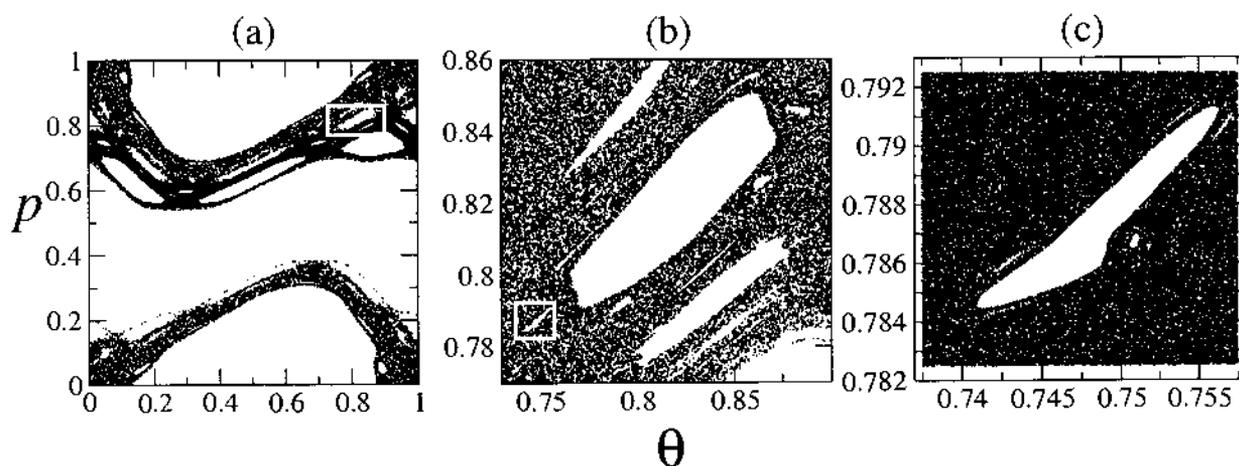


Figura 1.2: Ilhas em torno de ilhas no espaço de fases do mapa *standard* para $a = 1$ (veja a seção 3.1.1). Os pontos pretos representam uma única órbita que começa em $(\theta(0), p(0)) = (0, 0.7)$ (o mesmo dado inicial da Fig. 1.1). (a) Órbita no espaço de fases completo, $(\theta, p) \in [0, 1] \times [0, 1]$, para o tempo $0 \leq t \leq 4 \times 10^4$. (b) Ampliação do retângulo branco em (a) para $0 \leq t \leq 8 \times 10^5$. (c) Ampliação do retângulo branco em (b) para $0 \leq t \leq 2 \times 10^8$.

$S \equiv -\text{Tr}(\rho \ln \rho)$, onde ρ é o operador de densidade. No caso em que este operador é diagonal, a entropia tem a forma de Shannon

$$S \equiv -k_B \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i, \quad (1.1)$$

onde p_i é a probabilidade associada ao microestado i do sistema, entre os W possíveis ($\sum_{i=1}^W p_i = 1$), e $k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$ é a constante de Boltzmann. Na seqüência desta tese assumiremos, sem perda de generalidade, $k_B \equiv 1$. Se todos os possíveis microestados do sistema (sob específicas condições macroscópicas) são equiprováveis (*hipótese de equiprobabilidade*), se obtém o chamado *princípio de Boltzmann*:

$$S = \ln W. \quad (1.2)$$

É fácil ver que o funcional (1.1) satisfaz várias propriedades matemáticas. Entre elas, temos que S é *não-negativo*, *côncavo*, *extensivo* e *estável* [24] (ou *experimentalmente robusto*). Falaremos da propriedade de estabilidade na seção 1.2.3. A propriedade de extensividade significa que, dados dois sistemas *independentes* A e B (no sentido que $p_{ij}^{A+B} = p_i^A p_j^B$), a entropia associada ao conjunto dos dois é:

$$S(A+B) = S(A) + S(B). \quad (1.3)$$

Do ponto de vista epistemológico, a forma funcional da Eq. (1.1) deveria ser deduzida do próprio comportamento dinâmico do sistema [2]; infelizmente, este ponto permanece todavia em aberto [3] e a expressão (1.1) ainda é um *postulado* dentro da teoria da mecânica estatística (em [25] relatamos uma pequena, interessante lista histórica relacionada a este ponto).

1.2.1 Fundamentos matemáticos elementares

É interessante analisar as relações matemáticas elementares que estão por trás das propriedades do funcional S [26] e ver como estas propriedades são generalizadas no âmbito do formalismo não-extensivo. A função exponencial $y = \exp x$ é solução (com condição inicial

$y(0) = 0$) da equação diferencial

$$\frac{dy}{dx} = y. \quad (1.4)$$

A sua inversa, $\ln x$, tem a mesma forma do princípio de Boltzmann (1.2) e satisfaz a propriedade de aditividade

$$\ln(x_A x_B) = \ln x_A + \ln x_B. \quad (1.5)$$

Saindo do campo das equações diferenciais lineares, a mais simples equação não-linear que podemos considerar é

$$\frac{dy}{dx} = y^q \quad (q \in \mathbb{R}). \quad (1.6)$$

cuja solução (com a mesma condição inicial) é denominada *q-exponencial* e é dada por

$$y = [1 + (1 - q)x]^{\frac{1}{1-q}} \equiv \exp_q x \quad (x \in \mathbb{R}, \exp_1(x) \equiv \exp(x)). \quad (1.7)$$

Mais em detalhes, para $q < 1$ a função *q-exponencial* é nula para $x \leq -1/(1 - q)$ e cresce monotonicamente de 0 para $+\infty$ quando x varia de $-1/(1 - q)$ para $+\infty$; enquanto para $q > 1$ a função *q-exponencial* é definida para $x < 1/(q - 1)$ e cresce monotonicamente de 0 para $+\infty$ quando x varia de $-\infty$ para $1/(q - 1)$. Na Fig. 1.3 representamos a função *q-exponencial* para diferentes valores de q . A função inversa, chamada *q-logaritmo*, é

$$y = \frac{x^{1-q} - 1}{1 - q} \equiv \ln_q x \quad (x \in \mathbb{R}^+, \ln_1 x = \ln x), \quad (1.8)$$

e satisfaz à regra de *pseudo-aditividade*:

$$\ln_q(x_A x_B) = \ln_q x_A + \ln_q x_B + (1 - q)(\ln_q x_A)(\ln_q x_B). \quad (1.9)$$

Na construção do formalismo da mecânica estatística precisam ser executadas operações matemáticas elementares como por exemplo a inversão numérica ou a diferenciação de funções, ou ainda o logaritmo de uma potência. Observamos que enquanto as formas funcionais logaritmo e exponencial são invariantes em relação a estas operações, no caso do *q-logaritmo* e do *q-exponencial* o valor do parâmetro q vem *renormalizado*. Por exemplo.

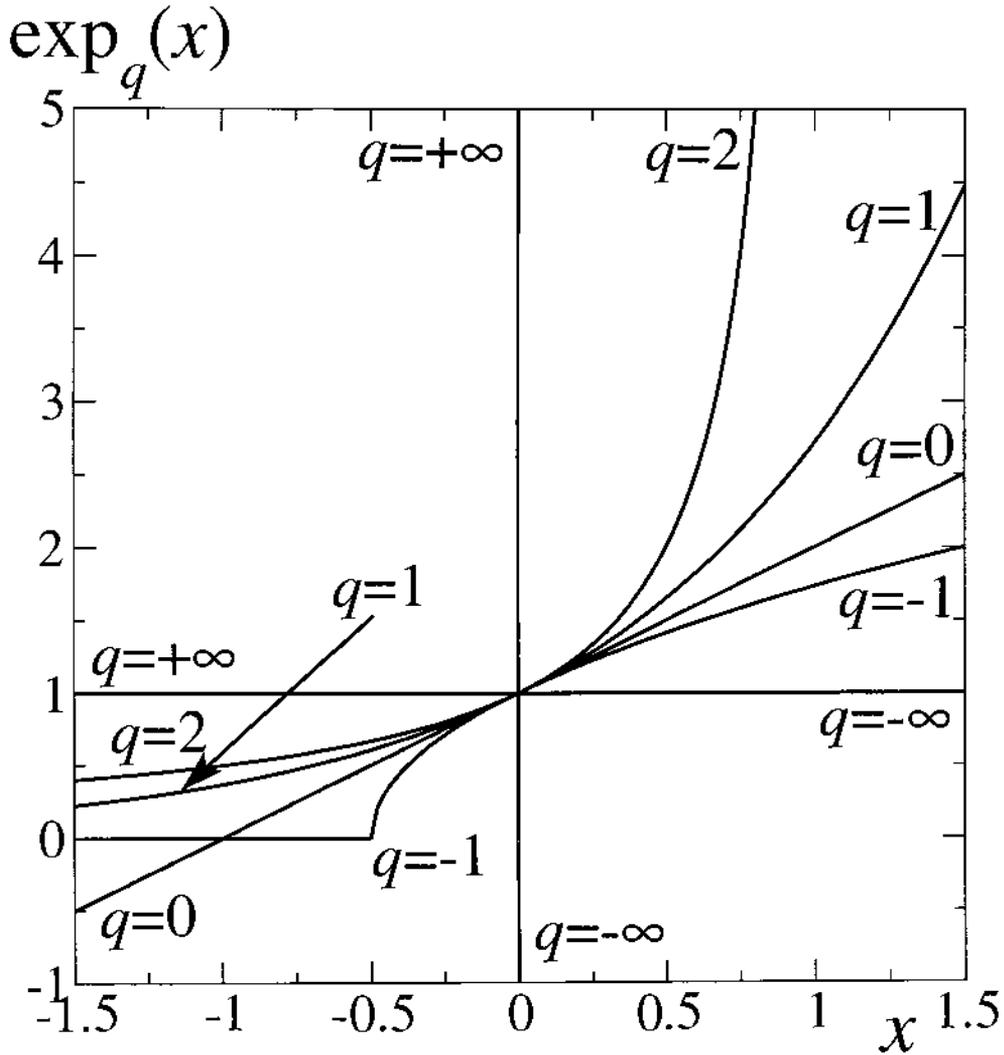


Figura 1.3: A função q -exponencial para diferentes valores de q . Para todos $q < 1$ a função é nula para $x \leq -\frac{1}{1-q}$; para todos $q > 1$ a função diverge em $x = -\frac{1}{1-q}$.

para x dentro do domínio de definição das relativas funções:

$$\frac{1}{\exp_q x} = \exp_{2-q}(-x), \quad (1.10)$$

$$\ln_q \frac{1}{x} = -\ln_{2-q} x, \quad (1.11)$$

$$\frac{d}{dx} \exp_q x = (\exp_q x)^q = \exp_{2-\frac{1}{q}}(qx), \quad (1.12)$$

$$\alpha \ln_q x = \ln_{1-\frac{1-\alpha}{\alpha}} x^\alpha, \quad (1.13)$$

$\forall x, q \in \mathbb{R}$ e $\alpha \neq 0$. Podemos portanto dizer que, dado um valor do parâmetro q , ele gera uma *família de valores* a ele associados, tipicamente através das regras (veja também [27]):

$$\text{inversão : } q \rightarrow q' = 2 - q, \quad (1.14)$$

$$\text{diferenciação : } q \rightarrow q' = 2 - \frac{1}{q} \quad (1.15)$$

$$q\text{-log de potências : } q \rightarrow q' = 1 - \frac{1-q}{\alpha}. \quad (1.16)$$

1.2.2 A entropia não-extensiva pode se tornar extensiva

A entropia de BG Eq. (1.1) pode ser escrita em duas formas levemente diferentes:

$$S = \sum_{i=1}^W p_i \ln \frac{1}{p_i} = \left\langle \ln \frac{1}{p_i} \right\rangle \quad (1.17)$$

$$= - \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i = - \langle \ln p_i \rangle, \quad (1.18)$$

onde $\langle \dots \rangle \equiv \sum_{i=1}^W (\dots) p_i$. A quantidade $\ln(1/p_i)$ é chamada as vezes *surpresa*, visto que a um evento certo ($p_i = 1$) corresponde uma “surpresa nula”, assim como a um evento quase impossível ($p_i \rightarrow 0$) corresponde uma infinita surpresa no caso que o evento se realize.

Generalizando as Eq.s (1.17) e (1.18) respectivamente, a entropia não-extensiva pode ser introduzida como

$$S_q = \left\langle \ln_q \frac{1}{p_i} \right\rangle = \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i^q}{q - 1}, \quad (1.19)$$

$$S_{q^\dagger} = - \left\langle \ln_{q^\dagger} p_i \right\rangle = \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i^{2-q^\dagger}}{1 - q^\dagger} \quad (1.20)$$

$(q, q^\dagger \in \mathbb{R})$. Note-se que no limite $q \rightarrow 1$ temos

$$p_i^q = p_i \exp[(q-1) \ln p_i] \sim p_i [1 + (q-1) \ln p_i],$$

portanto S_1 coincide com a entropia de BG Eq. (1.1). No caso de eqüiprobabilidade ($p_i = 1/W$) se obtém naturalmente

$$S = \frac{W^{1-q} - 1}{1-q} = \ln_q W. \quad (1.21)$$

A expressão (1.19) corresponde à proposta original [11]. Usando as propriedades matemáticas da sessão anterior podemos dizer que as Eq.s (1.20) e (1.19) são *formas conjugadas* da entropia não-extensiva [18], já que

$$S_{q^\dagger}^\dagger = S_{2-q}. \quad (1.22)$$

Como consequência é claro que S_q e $S_{q^\dagger}^\dagger$ são generalizações e não alternativas à entropia de BG.

Da pseudo-aditividade do q -logaritmo se deduz logo

$$S_q(A+B) = S_q(A) + S_q(B) + (1-q) S_q(A)S_q(B), \quad (1.23)$$

se A e B são dois sistemas independentes ($p_{ij}^{A+B} = p_i^A p_j^B$). Temos então que $q = 1$, $q < 1$ e $q > 1$ correspondem respectivamente aos casos *extensivo*, *super-extensivo* e *sub-extensivo*. É por causa desta propriedade que a generalização da mecânica estatística de BG baseada em S_q passou a ser chamada, na literatura, de *mecânica estatística não-extensiva*.

É porém importante ressaltar que a Eq. (1.23) vale somente sob a hipótese de independência entre A e B . De outro lado, se A e B são fortemente correlacionados de alguma forma especial, pode existir um valor especial q^* do parâmetro q tal que

$$S_{q^*}(A+B) = S_{q^*}(A) + S_{q^*}(B), \quad (1.24)$$

recuperando assim a propriedade de aditividade mas por meio de uma entropia diferente daquela clássica. Podemos ilustrar este ponto através de dois exemplos.

- (i) Em um sistema de N elementos quase-independentes, o número total de possibilidades W escala como $W(N) \sim \mu^N$, com $\mu > 1$ (por exemplo, $\mu = 2$ no caso de uma variável de spin com dois valores, $\mu = 6$ para um dado,...). A sua entropia S_q é dada por

$$S_q(N) = \ln_q W(N) \sim \frac{\mu^{N(1-q)} - 1}{1 - q} \quad (1.25)$$

e a extensividade é obtida se e apenas se $q = 1$. Em outras palavras, $S_1(N) \sim N \ln \mu \propto N$.

- (ii) A dinâmica de um sistema cujos elementos são correlacionados em todas as escalas pode implicar em uma ocupação parcial do espaço de fases do sistema. Portanto, o número total de possibilidade dinamicamente acessíveis pode ter uma lei de escala do tipo $W(N) \sim N^\rho$ (com $\rho > 0$). A sua entropia (na hipótese simplificativa deste “número reduzido” de possibilidades serem equiprováveis entre elas) S_q é dada por

$$S_q(N) = \ln_q W(N) \sim \frac{N^{\rho(1-q)} - 1}{1 - q} \quad (1.26)$$

e a extensividade é obtida se e apenas se

$$q = q^* \equiv 1 - \frac{1}{\rho} < 1. \quad (1.27)$$

Em outras palavras, $S_{q^*}(N) \propto N$.

Voltando ao conceito termodinâmico de entropia introduzido por Clausius, poderíamos achar fisicamente “natural” a entropia ser extensiva. *É significativo observar que nos casos de sistemas fortemente correlacionados temos que mudar o funcional de BG para satisfazer esta propriedade.*

1.2.3 Algumas propriedades da entropia não-extensiva

Depois da proposta original [11] do funcional S_q , uma grande quantidade de trabalhos foram dedicados a analisar as suas propriedades matemáticas (veja, por exemplo, [28] e referências ali sugeridas). Aqui queremos somente ressaltar algumas propriedades básicas.

que permitem apreciar a singularidade de S_q em relação a outras possíveis generalizações da entropia de BG.

Concavidade. Se consideramos duas distribuições de probabilidade $\{p_i\}$ e $\{p'_i\}$ por um dado sistema ($i = 1, 2, \dots, W$), podemos definir a *soma convexa* das duas distribuições de probabilidade, a distribuição p''_i :

$$p''_i \equiv \mu p_i + (1 - \mu)p'_i \quad (0 < \mu < 1). \quad (1.28)$$

Um funcional entrópico $S(\{p_i\})$ é *côncavo* se e só se para todos μ , $\{p_i\}$ e $\{p'_i\}$

$$S(\{p''_i\}) \geq \mu S(\{p_i\}) + (1 - \mu)S(\{p'_i\}). \quad (1.29)$$

Um funcional é *convexo* se na Eq. (1.29) trocamos \geq para \leq . É fácil ver que S_q é côncavo (convexo) para todos $\{p_i\}$ e $q > 0$ ($q < 0$). É importante lembrar que esta propriedade implica, no contexto da mecânica estatística, em *estabilidade termodinâmica*, ou seja, estabilidade em relação às perturbações de energia. Isto significa que o funcional entrópico é definido de maneira tal que o estado estacionário (por exemplo, o equilíbrio termodinâmico) o extremiza (respectivamente com um máximo para $q > 0$ e um mínimo para $q < 0$). Qualquer perturbação da distribuição de probabilidade $\{p_i\}$ que extremiza a entropia é seguida por uma tendência a voltar para $\{p_i\}$. Além disso, esta propriedade permite que dois sistemas com diferentes temperaturas se equilibrem a uma mesma temperatura.

Estabilidade ou robustez experimental Um funcional entrópico $S(\{p_i\})$ é *estável* ou *experimentalmente robusto* se e apenas se, para qualquer $\epsilon > 0$ existe um δ_ϵ tal que, independentemente de W ,

$$\sum_{i=1}^W |p_i - p'_i| \leq \delta_\epsilon \Rightarrow \left| \frac{S(\{p_i\}) - S(\{p'_i\})}{S_{max}} \right| < \epsilon. \quad (1.30)$$

Em particular, isto implica que

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \lim_{W \rightarrow \infty} \left| \frac{S(\{p_i\}) - S(\{p'_i\})}{S_{max}} \right| = \lim_{W \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left| \frac{S(\{p_i\}) - S(\{p'_i\})}{S_{max}} \right| = 0. \quad (1.31)$$

Lesche [24] sugeriu que a robustez experimental é um atributo necessário para que um funcional entrópico seja uma quantidade física, porque ele essencialmente garante que sob

perturbações arbitrariamente pequenas das distribuições de probabilidade a variação relativa de entropia permaneça pequena. Obviamente esta propriedade não deve ser confundida com a estabilidade termodinâmica discutida anteriormente. Recentemente foi demonstrado [29] que a entropia S_q é estável para todos $q > 0$.

1.2.4 Outras possíveis generalizações da entropia de Boltzmann-Gibbs

Existem vários outros funcionais que generalizam a entropia de BG. Um desses é a *entropia de Renyi* [30] S_q^R que é definida como

$$S_q^R \equiv \frac{\ln \sum_{i=1}^W p_i^q}{1-q} = \frac{\ln[1 + (1-q)S_q]}{1-q}. \quad (1.32)$$

Uma outra forma entrópica foi introduzida por Landsberg e Vedral [31] e, independentemente, por Rajagopal e Abe [32]. Ela é às vezes chamada *entropia não-extensiva normalizada* e é definida como

$$S_q^{LVRA} \equiv \frac{1 - \frac{1}{\sum_{i=1}^W p_i^q}}{1-q} = \frac{S_q}{1 + (1-q)S_q}. \quad (1.33)$$

Supondo que seja necessário generalizar a mecânica estatística de BG modificando o funcional entrópico, surge a questão de qual dessas formas entrópicas (ou também de outras como por exemplo a *escort entropy* S_q^E definida em [33]) seja a mais apropriada. Por enquanto podemos antecipar que nenhuma das formas entrópicas S_q^R , S_q^{LVRA} , S_q^E são côncavas ou experimentalmente robustas [34] (veja, porém, [35]). No final do capítulo abordaremos também uma questão ligada ao comportamento dinâmico do sistema físico que se quer descrever. Se trata da generalização de um teorema central na teoria de sistemas dinâmicos não-lineares, que é o teorema de Pesin [36]. Em alguns casos em que o sistema exibe uma dinâmica complexa é de fato possível, através da generalização deste teorema, determinar *a priori* a forma do funcional entrópico (veja por exemplo [18]). Veremos que nestes casos parece ser verificada a hipótese de Beck [37], ou seja que a entropia não-extensiva é “a segunda melhor medida de informação, logo depois da entropia de Shannon”.

1.3 Conexão com a termodinâmica

Na literatura existem várias propostas para a forma do funcional entrópico, algumas com uma certa utilidade no âmbito da teoria da informação. Porém, o formalismo da mecânica estatística requer mais que a mera adoção de um funcional entrópico: a distribuição de equilíbrio (ou de *meta-equilíbrio*, em uma generalização do formalismo clássico) deve extremizar a entropia satisfazendo outros vínculos, como o vínculo de norma ou vínculos em relação ao valor médio de outras quantidades (por exemplo a energia). Infelizmente, na generalização de uma arquitetura teórica, não é óbvio quais vínculos devem ser mantidos e quais devem ser generalizados, e de qual forma. Nesta seção mostraremos de forma resumida como a termodinâmica pode ser formalmente derivada (segundo as linhas de Gibbs) para distribuições de meta-equilíbrio baseadas na entropia S_q .

Deve estar claro desde agora que as distribuições derivadas neste contexto para $q \neq 1$ não correspondem ao equilíbrio térmico (abordado pelo formalismo de BG através da famosa hipótese de Boltzmann do *caos molecular*), e sim a um estado *quase-estacionário* ou de *meta-equilíbrio*, indicado para descrever uma certa classe de sistemas complexos.

1.3.1 O formalismo canônico

Para um sistema em contato com um grande reservatório térmico, em analogia com a abordagem seguida pelo próprio Gibbs [11, 33], pode-se procurar a distribuição que otimiza a entropia S_q definida em Eq. (1.19), com a condição de normalização $\sum_{i=1}^W p_i = 1$ e o seguinte vínculo pelo valor médio da energia [33]:

$$\sum_{i=1}^W P_i E_i \equiv \frac{\sum_{i=1}^W p_i^q E_i}{\sum_{j=1}^W p_j^q} = U_q, \quad (1.34)$$

onde

$$P_i \equiv \frac{p_i^q}{\sum_{j=1}^W p_j^q} \quad (1.35)$$

é chamada distribuição *escort* [7], e $\{E_i\}$ são os autovalores do sistema Hamiltoniano, com as condições de contorno adotadas. É importante ressaltar que o parâmetro q que entra

nas distribuições escort é o mesmo que caracteriza a entropia S_q (por uma discussão deste ponto importante veja [33]). Em analogia com a estatística de BG, na primeira versão da generalização não-extensiva [11] foi utilizado o vínculo tradicional

$$\sum_{i=1}^W p_i E_i = U. \quad (1.36)$$

Esta escolha produz distribuições estacionárias $(2 - q)$ -exponenciais, mas não permite escrever uma função de partição, nem tratar problemas como a super difusão de Lévy, onde aparece um segundo momento divergente [38]. Uma outra escolha seria [11, 39] fixar

$$\sum_{i=1}^W p_i^q E_i, \quad (1.37)$$

mas isto, se de um lado resolve os problemas relacionados às divergências, do outro lado cria novos problemas. Por exemplo, a distribuição estacionária *não* é invariante para trocas de nível zero da escala de energia, e a relação $\sum_{i=1}^W p_i^q \neq 1$ implica que quando este vínculo é aplicado a uma constante, *não* dá, como resultado, a mesma constante.

Na realidade, a questão de qual é a forma mais correta de construir a generalização do formalismo canônico ainda tem aspectos em aberto [40, 41]. A expectativa presente é que através de uma dedução do formalismo a partir da própria *dinâmica* [42] se possa definir a correta forma matemática do formalismo.

Observe-se que qualquer procedimento que leve a uma função q -exponencial \exp_q otimizando a entropia S_q (1.19), produz a função q -exponencial \exp_{2-q} se se otimiza, em lugar de S_q , a forma conjugada S_{2-q}^\dagger (1.20). Esta é uma das manifestações das propriedades de renormalização do valor do parâmetro q descritas na seção 1.2.1.

Um outro ponto importante de frisar é que, otimizando um funcional entrópico, também se otimizam todas as funções monotônicas deste funcional. É este por exemplo o caso, em relação a entropia S_q , da entropia de Renyi Eq. (1.32).

A otimização de S_q com os vínculos $\sum_{i=1}^W p_i = 1$ e (1.34) com multiplicador de Lagrange β produz:

$$p_i = \frac{[1 - (1 - q)\beta_q(E_i - U_q)]^{\frac{1}{1-q}}}{\bar{Z}_q} = \frac{e_q^{-\beta_q(E_i - U_q)}}{\bar{Z}_q}, \quad (1.38)$$

com

$$\bar{Z}_q \equiv \sum_{j=1}^W e_q^{-\beta_q(E_j - U_q)} \quad (1.39)$$

e

$$\beta_q \equiv \frac{\beta}{\sum_{j=1}^W p_j^q}. \quad (1.40)$$

Se obtém também que a distribuição de meta-equilíbrio pode ser escrita escondendo implicitamente a presença do termo U_q , em uma forma às vezes mais conveniente quando se quer uma comparação com dados experimentais ou computacionais:

$$p_i = \frac{[1 - (1 - q)\beta'_q E_i]^{\frac{1}{1-q}}}{Z'_q} = \frac{e_q^{-\beta'_q E_i}}{Z'_q}, \quad (1.41)$$

com

$$Z'_q \equiv \sum_{j=1}^W e_q^{-\beta'_q E_j}. \quad (1.42)$$

e

$$\beta'_q \equiv \frac{\beta}{\sum_{j=1}^W p_j^q + (1 - q)\beta U_q}. \quad (1.43)$$

É fácil conferir que:

- (i) para $q \rightarrow 1$ se recupera o peso de BG $p_i = e^{-\beta E_i}/Z_1$;
- (ii) para $q > 1$, emerge uma cauda que segue uma lei de potência;
- (iii) para $q < 1$, o formalismo impõe um corte de alta energia ($p_i = 0$) toda vez que o argumento da q -exponencial torna-se negativo.

1.3.2 A estrutura de Legendre

Mesmo sendo o resultado de um simples exercício, a primeira vista parece um pouco surpreendente notar que a estrutura de Legendre da termodinâmica seja independente da forma do funcional entrópico e também da forma do vínculo do valor esperado da energia. Vejamos a razão com algum detalhe, como mostrado pela primeira vez em [43]. Assumimos

que a entropia e o valor esperado da energia sejam funcionais diferenciáveis arbitrários da distribuição de probabilidade $\{p_i\}_{i=1,2,\dots,W}$:

$$S = S(p_1, \dots, p_W), \quad (1.44)$$

$$U = U(p_1, \dots, p_W). \quad (1.45)$$

O outro vínculo, lembramos, é a condição de normalização

$$\sum_{i=1}^W p_i = 1. \quad (1.46)$$

Da condição

$$\delta \left(S - \beta U - \alpha \sum_{i=1}^W p_i \right) = 0, \quad (1.47)$$

obteremos

$$\frac{\partial S}{\partial p_i} - \beta \frac{\partial U}{\partial p_i} - \alpha = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, W), \quad (1.48)$$

que fornece a solução

$$p_i = p_i(\alpha, \beta). \quad (1.49)$$

Obviamente a condição de normalização (1.46) permite expressar o parâmetro de Lagrange α em função do parâmetro β ,

$$\alpha = \alpha(\beta), \quad (1.50)$$

de modo que a solução (1.49) pode ser escrita na forma mais simples

$$p_i = p_i(\beta) = p_i(\alpha(\beta), \beta). \quad (1.51)$$

As derivadas em relação do único parâmetro termodinâmico β dão agora

$$\frac{dS}{d\beta} = \sum_{i=1}^W \frac{\partial S}{\partial p_i} \left(\frac{\partial p_i}{\partial \beta} + \frac{\partial p_i}{\partial \alpha} \frac{\partial \alpha}{\partial \beta} \right), \quad (1.52)$$

$$\frac{dU}{d\beta} = \sum_{i=1}^W \frac{\partial U}{\partial p_i} \left(\frac{\partial p_i}{\partial \beta} + \frac{\partial p_i}{\partial \alpha} \frac{\partial \alpha}{\partial \beta} \right). \quad (1.53)$$

Mas agora, a condição de normalização (1.46) implica em

$$\sum_{i=1}^W \left(\frac{\partial p_i}{\partial \beta} + \frac{\partial p_i}{\partial \alpha} \frac{\partial \alpha}{\partial \beta} \right) = 0; \quad (1.54)$$

isto, junto com (1.48)

$$\beta \frac{\partial U}{\partial p_i} = \frac{\partial S}{\partial p_i} - \alpha, \quad (1.55)$$

leva a

$$\beta \frac{dU}{d\beta} = \sum_{i=1}^W \left(\frac{\partial S}{\partial p_i} - \alpha \right) \left(\frac{\partial p_i}{\partial \beta} + \frac{\partial p_i}{\partial \alpha} \frac{\partial \alpha}{\partial \beta} \right), \quad (1.56)$$

ou seja

$$\beta \frac{dU}{d\beta} = \frac{dS}{d\beta}. \quad (1.57)$$

Em outras palavras, a mais básica relação termodinâmica

$$\frac{dS}{dU} = \frac{dS/d\beta}{dU/d\beta} = \beta. \quad (1.58)$$

vale para qualquer forma do funcional entrópico (1.44) e do vínculo generalizado (1.45).

A particularidade da forma (1.34) do vínculo da energia, assim como também da versão [39] $\sum_{i=1}^W p_i^q E_i$, é que nestes casos o parâmetro α se fatoriza e pode ser obtido de forma explícita. Isto implica que se possa escrever uma *função de partição*, com a vantagem de ter facilidades práticas para calcular quantidades de interesse termodinâmico.

Voltando à generalização do formalismo canônico através do vínculo (1.34) temos portanto que, para todos valores de q ,

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S_q}{\partial U_q} \quad \left(T \equiv \frac{1}{\beta} \right). \quad (1.59)$$

Podem também ser provado que a energia livre F_q é dada por

$$F_q \equiv U_q - TS_q = -\frac{1}{\beta} \ln_q Z_q, \quad (1.60)$$

onde

$$\ln_q Z_q = \frac{Z_q^{1-q} - 1}{1-q} = \frac{\bar{Z}_q^{1-q} - 1}{1-q} - \beta U_q, \quad (1.61)$$

e a energia interna por

$$U_q = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln_q Z_q. \quad (1.62)$$

Finalmente, para o calor específico C_q vale

$$C_q \equiv T \frac{\partial S_q}{\partial T} = \frac{\partial U_q}{\partial T} = -T \frac{\partial^2 F_q}{\partial T^2}. \quad (1.63)$$

1.4 Super-estatística

Recentemente Beck e Cohen [44] propuseram uma interessante abordagem alternativa para chegar à distribuição (1.41), baseada somente na mecânica estatística ordinária. Esta proposta é chamada *super-estatística*, já que consiste na superposição de duas estatísticas. Aqui analisamos resumidamente as idéias básicas. Consideramos um sistema fora do equilíbrio sujeito a *flutuações espaço-temporais de um parâmetro intensivo*, como por exemplo o inverso da temperatura β . Localmente, ou seja em regiões espaciais caracterizadas por células (*no espaço físico*) onde β é aproximadamente constante, o sistema é descrito pela mecânica estatística ordinária, ou seja pelo fator de Boltzmann $e^{-\beta E}$, onde E é uma energia efetiva de cada célula. No longo prazo o sistema é descrito por uma média espaço-temporal sobre as flutuações de β . Desta forma se obtém a superposição da estatística $\exp(-\beta E)$ com aquela do próprio β . Se pode definir um fator de Boltzmann médio

$$B(E) \equiv \int_0^\infty d\beta f(\beta) e^{-\beta E}, \quad (1.64)$$

onde $f(\beta)$ é a distribuição de probabilidade de β . Pela assim chamada super-estatística de *tipo A*, se normaliza este fator de Boltzmann efetivo obtendo a distribuição de probabilidade estacionária no longo prazo

$$p(E) = \frac{B(E)}{Z}, \quad (1.65)$$

onde

$$Z \equiv \int_0^\infty dE B(E). \quad (1.66)$$

Na super-estatística de *tipo B* se inclui a normalização (dependente de β) no processo de média. Neste caso

$$p(E) \equiv \int_0^\infty d\beta f(\beta) \frac{e^{-\beta E}}{Z(\beta)}, \quad (1.67)$$

onde $Z(\beta)$ é a constante de normalização de $e^{-\beta E}$ para um dado β . Ambas as abordagens podem ser mapeadas uma na outra definindo uma nova densidade de probabilidade

$$\tilde{f}(\beta) \equiv c \frac{f(\beta)}{Z(\beta)}, \quad (1.68)$$

onde c é uma constante de normalização. Claramente uma super-estatística de tipo B com f é equivalente a uma super-estatística de tipo A com \tilde{f} .

O aspecto interessante da super-estatística é que ela é baseada na mecânica estatística ordinária (nos fatores de Boltzmann $e^{-\beta E}$ obtidos maximizando localmente a entropia de BG), mais as flutuações em β . É também possível introduzir formas entrópicas generalizadas que são máximas para estes $p(E)$ [45] e que são associados a uma descrição termodinâmica efetiva de um sistema fora do equilíbrio onde se média sobre as flutuações. Além disto, a abordagem super-estatística permite derivar formulas explícitas que associam o parâmetro q à variância relativa das flutuações de β .

Uma realização dinâmica simples da super-estatística pode ser construída considerando equações diferenciais estocásticas com parâmetros espaço-temporais flutuantes [13]. Para tal se considere uma equação de Langevin para uma variável u ,

$$\dot{u} = \gamma F(u) + \sigma L(t), \quad (1.69)$$

onde $L(t)$ é um ruído Gaussiano, $\gamma > 0$ é uma constante de fricção, σ descreve a intensidade do ruído, e $F(u) \equiv -\partial V(u)/\partial u$ é uma força de *drift*. Se γ e σ são constantes, então a densidade de probabilidade estacionária de u é proporcional a $e^{-\beta V(u)}$, onde

$$\beta \equiv \frac{\gamma}{\sigma^2} \quad (1.70)$$

pode ser identificado como o inverso da temperatura da mecânica estatística ordinária. Porém, mais em geral, os parâmetros γ e σ podem flutuar, de modo que $\beta = \gamma/\sigma^2$ tenha a distribuição de probabilidade $f(\beta)$. Assumimos que estas flutuações atuem numa escala de tempo suficientemente grande para que o sistema possa alcançar o equilíbrio local. Neste caso se obtém, pela *probabilidade condicional* $p(u|\beta)$ (probabilidade de um certo valor de u dado um certo valor de β):

$$p(u|\beta) = \frac{e^{-\beta V(u)}}{Z(\beta)}; \quad (1.71)$$

pela *probabilidade conjunta* $p(u, \beta)$ (probabilidade de observar um certo valor de u e um certo valor de β):

$$p(u, \beta) = p(u|\beta)f(\beta); \quad (1.72)$$

e pela *probabilidade marginal* $p(u)$ (probabilidade de observar um certo valor de u qualquer seja o valor de β):

$$p(u) = \int_0^{\infty} d\beta p(u|\beta) f(\beta). \quad (1.73)$$

Esta distribuição marginal é a distribuição canônica generalizada da super-estatística $f(\beta)$ considerada. Esta formulação corresponde à super-estatística de tipo B.

Notando que β tem um suporte positivo (de modo que, por exemplo, distribuições Gaussianas são excluídas para $f(\beta)$), uma escolha interessante para $f(\beta)$ é dada pela distribuição χ^2 :

$$f(\beta) = \frac{1}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \left(\frac{n}{2}\beta_0\right)^{\frac{n}{2}} \beta^{\frac{n}{2}-1} \exp\left(-\frac{n\beta}{2\beta_0}\right). \quad (1.74)$$

Com efeito, enquanto que somando variáveis aleatórias Gaussianas se obtém uma variável aleatória Gaussiana, somando variáveis aleatórias Gaussianas *ao quadrado* se obtém uma distribuição χ^2 (chamada também de distribuição Γ). Neste sentido a distribuição χ^2 é típica para variáveis aleatórias positivas. Indicamos n variáveis aleatórias independentes como $\{X_i\}_{i=1,2,\dots,n}$, e assumimos que elas tenham média nula. Temos então que a densidade de probabilidade associada a

$$\beta \equiv \sum_{i=1}^n X_i^2 \quad (1.75)$$

é dada pela Eq. (1.74). A média do parâmetro flutuante β é dada por

$$\langle\beta\rangle = n\langle X^2\rangle = \int_0^{\infty} d\beta f(\beta)\beta = \beta_0, \quad (1.76)$$

e a variância por

$$\langle\beta^2\rangle - \beta_0 = \frac{2}{n}\beta_0^2. \quad (1.77)$$

Para forças de *drift* lineares $F(u) = -u$ se obtém, pela probabilidade condicional

$$p(u|\beta) = \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} \exp\left(-\frac{\beta u^2}{2}\right), \quad (1.78)$$

e pela probabilidade marginal

$$p(u) = \frac{\Gamma\left(\frac{n}{2} + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \left(\frac{\beta_0}{\pi n}\right)^{\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{\beta_0}{n}u^2\right)^{-\frac{n}{2}-\frac{1}{2}}. \quad (1.79)$$

A equação diferencial estocástica (1.69), com um $\beta = \gamma/\sigma^2$ distribuído com uma distribuição χ^2 , produz então a distribuição canônica generalizada da mecânica estatística não-extensiva

$$p(u) \propto \left[1 - (1 - q) \frac{\tilde{\beta}}{2} u^2 \right]^{\frac{1}{1-q}}, \quad (1.80)$$

se fazemos as seguintes identificações:

$$q \equiv 1 + \frac{2}{n+1}, \quad (1.81)$$

$$\tilde{\beta} \equiv \frac{2}{3-q} \beta_0. \quad (1.82)$$

Observe-se que, dentro desta abordagem, obtemos distribuições q -exponenciais com $q > 1$.

Existem varias outras super-estatísticas, definidas pela escolha da distribuição $f(\beta)$. Notavelmente, todas elas têm a mesma correção da primeira ordem do fator de Boltzmann para E pequeno, que coincide com a estatística não-extensiva [44]. Para qualquer destas super-estatísticas se pode em geral definir um parâmetro q através da relação (veja também [46])

$$q = \frac{\langle \beta^2 \rangle}{(\beta)^2}, \quad (1.83)$$

que, como vimos, no caso da distribuição χ^2 coincide com o índice entrópico da mecânica estatística não-extensiva.

1.5 Determinação dinâmica do parâmetro q

Desde a proposta original [11], o formalismo não-extensivo atraiu a atenção de muitos pesquisadores. Atualmente a bibliografia relacionada ao tema conta com mais de 1250 trabalhos [47], assinados por mais de 700 autores de 48 países diferentes. Assim, é difícil questionar a utilidade do formalismo na descrição de fenômenos complexos que exibem comportamentos do tipo lei de potência [48].

No entanto, um ponto fundamental é conseguir uma determinação *a priori* do parâmetro q , de modo que o conhecimento de alguns aspectos microscópicos leve a uma *predição* do

comportamento macroscópico do sistema. Esta questão ainda tem aspectos a ser esclarecidos, embora nos últimos anos vários avanços importantes foram conseguidos. Em geral se acredita que a resposta esteja ligada a uma ocupação parcial (tipicamente multifractal), pela trajetória dinâmica, do espaço de fases disponível ao sistema sob determinadas condições macroscópicas. Isto implica a violação da hipótese de ocupação equiprovável dos estados dinamicamente acessíveis, em todas as escalas.

Nesta tese veremos como dinâmicas complexas levam a fenômenos macroscópicos anômalos e para alguns modelos suficientemente simples, como pode ser feita uma ligação entre a dinâmica e o parâmetro q . Uma boa parte da análise será dedicada a mapas dinâmicos, enquanto na parte final abordaremos sistemas Hamiltonianos de muitos corpos. Antes de entrar nestes detalhes é bom lembrar que, como foi antecipado na abertura deste trabalho, a fundamentação dinâmica da própria estatística de BG é um argumento que ainda tem aspectos básicos em aberto [3, 4, 5, 6].

Na área de sistemas dinâmicos não-lineares uma ligação fundamental entre dinâmica e funcional entrópico é dada pelo teorema de Pesin [36] que liga a sensibilidade às condições iniciais com a taxa de produção de entropia. Nas próximas duas seções analisamos estes conceitos gerais.

1.5.1 Sensibilidade às condições iniciais

Um dos aspectos fundamentais da teoria de sistemas caóticos é associado à descrição de trajetórias irregulares no espaço de fases. Esta característica é estritamente relacionada à instabilidade do sistema e ao crescimento de entropia. Dado um ponto $\mathbf{x}(0)$ no espaço de fases de um modelo dinâmico e um vetor distância $\delta\mathbf{x}(0)$ no espaço de fases, a sensibilidade às condições iniciais ξ é definida como

$$\xi(\mathbf{x}(0), \delta\mathbf{x}(0), t) \equiv \lim_{|\delta\mathbf{x}(0)| \rightarrow 0} \frac{|\delta\mathbf{x}(t)|}{|\delta\mathbf{x}(0)|}, \quad (1.84)$$

onde t é a variável temporal. Para um sistema caótico, a sensibilidade às condições iniciais é assintoticamente exponencial e tipicamente independente de $\mathbf{x}(0)$ e $\delta\mathbf{x}(0)$:

$$\xi = \exp(\lambda t), \quad (1.85)$$

onde λ é o *máximo coeficiente de Lyapunov* do sistema. Existe de fato todo um *espectro* de coeficientes de Lyapunov $\{\lambda^{(k)}\}_{k=1,2,\dots,d}$, onde d é a dimensão do espaço de fases. Se o sistema for conservativo, a conservação de volume no espaço de fases implica na condição $\sum_{k=1}^d \lambda^{(k)} = 0$. Se além de ser conservativo o sistema é simplético (ou seja, derivado de um sistema Hamiltoniano), os coeficientes de Lyapunov são acoplados em pares, onde cada elemento do par é o oposto do outro. Do outro lado, sistemas regulares exibem tipicamente um crescimento linear de ξ em relação ao tempo, de modo que na transição entre caoticidade e regularidade o coeficiente máximo de Lyapunov se anula.

Com efeito, vários sistemas físicos, biológicos, econômicos e outros exibem situações mais complicadas, associadas a um espaço de fases que revela padrões complexos e dinâmicas anômalas [49]. Em muitos destes casos, o sistema é caracterizado por uma sensibilidade às condições iniciais de tipo algébrico.

Em relação ao formalismo não-extensivo foi conjecturado em 1997 [50] (veja também [51]) que em algumas destas situações (especialmente em presença de estruturas fractais no espaço de fases), a sensibilidade às condições iniciais seja dada por uma lei de potência q -exponencial:

$$\xi(t) = \exp_q(\lambda_q t) \equiv [1 + (1 - q)\lambda_q t]^{\frac{1}{1-q}}, \quad (1.86)$$

caracterizada, além do parâmetro $q \in \mathbb{R}$, pelo *coeficiente de Lyapunov generalizado* $\lambda_q \in \mathbb{R}$ (note-se que, como de costume, o coeficiente de Lyapunov ordinário $\lambda \equiv \lambda_1$ é recuperado no limite $q \rightarrow 1$). Usando as propriedades da função q -exponencial (Fig. 1.3), nesta generalização se distinguem os casos mostrados na tabela 1.1. Esta conjectura foi recentemente provada de forma analítica para as bifurcações de forquilha (insensibilidade fraca) e tangente (insensibilidade fraca no lado esquerdo e sensibilidade super-forte no lado direito) [16] e para o limiar do caos (insensibilidade fraca) [17, 18] de mapas unimodais unidimensionais, como vemos em detalhe no próximo capítulo. Nestes casos foi possível, utilizando

	$q < 1$	$q = 1$	$q > 1$
$\lambda_q < 0$	<i>insensibilidade</i> <i>super-forte</i>	<i>insensibilidade forte</i> e.g. mapa logístico $\mu < \mu_\infty$	<i>insensibilidade fraca</i> e.g. [16]
$\lambda_q > 0$	<i>sensibilidade fraca</i> e.g. [16, 17, 18, 52, 53]	<i>sensibilidade forte</i> e.g. mapa logístico $\mu > \mu_\infty$	<i>sensibilidade</i> <i>super-forte</i> e.g. [16]

Tabela 1.1: Sensibilidade às condições iniciais na abordagem não-extensiva. Não existem ainda exemplos para o caso de insensibilidade super-forte às condições iniciais.

técnicas de grupo de renormalização, determinar exatamente o valor de q e de λ_q . Existem também evidências numéricas de sensibilidade fraca às condições iniciais para os mapas simpléticos que trataremos no capítulo 3 [52, 53]. Em relação aos termos introduzidos na tabela 1.1, falaremos então de *caos forte (fraco)* se a sensibilidade às condições iniciais é forte (fraca).

Note-se, à margem, que da mesma forma que a sensibilidade às condições iniciais exponencial satisfaz a equação diferencial $\dot{\xi} = \lambda\xi$ com condição inicial $\xi(0) = 1$, a sensibilidade q -exponencial é solução da equação $\dot{\xi} = \lambda_q\xi^q$, com o mesmo dado inicial [54]. No capítulo 3 voltaremos a aprofundar este ponto.

1.5.2 Produção de entropia

No estudo dos sistemas dinâmicos não-lineares uma outra forma de quantificar o caos é dado pela taxa de produção de entropia. Este conceito foi introduzido por Kolmogorov e Sinai (veja por exemplo [9, 7]) e faz referência explícita à forma funcional (1.1) em relação a uma medida de probabilidade definida em correspondência de uma partição do espaço de fases. Um resultado central neste contexto foi obtido por Pesin [36], que demonstrou que para sistemas Hamiltonianos típicos a taxa de produção de entropia de Kolmogorov-Sinai \mathcal{K} é igual à soma dos coeficientes de Lyapunov positivos:

$$\sum_{\lambda^{(k)} > 0} \lambda^{(k)} = \mathcal{K}. \quad (1.87)$$

Esta fórmula incorpora a importante conexão entre a perda de informação, expressa por \mathcal{K} , e a dependência nos dados iniciais, representada pelos coeficientes de Lyapunov, para estados caóticos.

Foi mostrado numericamente [55] que, para mapas Hamiltonianos de baixa dimensão, a taxa de produção de entropia de Kolmogorov-Sinai \mathcal{K} coincide com a entropia média K produzida por unidade de tempo pela evolução dinâmica de um *ensemble* estatístico inicialmente colocado fora do equilíbrio: $K = \mathcal{K}$. Mais precisamente, consideramos \mathcal{N} cópias não-interagentes do sistema dinâmico em exame e um *coarse graining* no espaço de fases constituído por uma partição de W (hiper)células (d -volumétricas) não-intersectantes. Por cada passo temporal t é definida uma distribuição de probabilidade $\{p_i\}_{i=1,2,\dots,W}$ através do número de ocupação n_i de cada célula, $p_i \equiv n_i/\mathcal{N}$ ($\sum_i p_i = 1$). Temos então

$$K \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{W \rightarrow \infty} \lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \frac{\langle S \rangle(t)}{t}, \quad (1.88)$$

onde S é a entropia (1.1) e a média $\langle \rangle$ é obtida considerando várias realizações diferentes, cada uma caracterizada por um diverso *ensemble* de dados iniciais. Na seqüência desta tese, consideramos tipicamente dados iniciais caracterizados por um *ensemble* de \mathcal{N} cópias do sistema todas distribuídas aleatoriamente dentro uma única (hiper)célula da partição. Desta maneira, a entropia inicial é nula, já que todas as probabilidades menos uma são zero. Os valores médios são depois obtidos amostrando o espaço de fases *completo*, mudando a posição da (hiper)célula inicial.

Agora, se o coeficiente máximo de Lyapunov é nulo, o uso da forma entrópica tradicional pela definição de quantidades como a entropia de Kolmogorov-Sinai fornece pouca informação e não ajuda por exemplo a distinguir entre caoticidade fraca e integrabilidade (veja o capítulo 3 para a definição de integrabilidade). Generalizando o resultado de Latora e Baranger [55], a entropia de Kolmogorov-Sinai q -generalizada pode ser definida como

$$K_q \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{W \rightarrow \infty} \lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \frac{\langle S_q \rangle(t)}{t}. \quad (1.89)$$

A Fig. 1.4 mostra de forma esquemática o significado desta generalização para uma situação de caos forte.

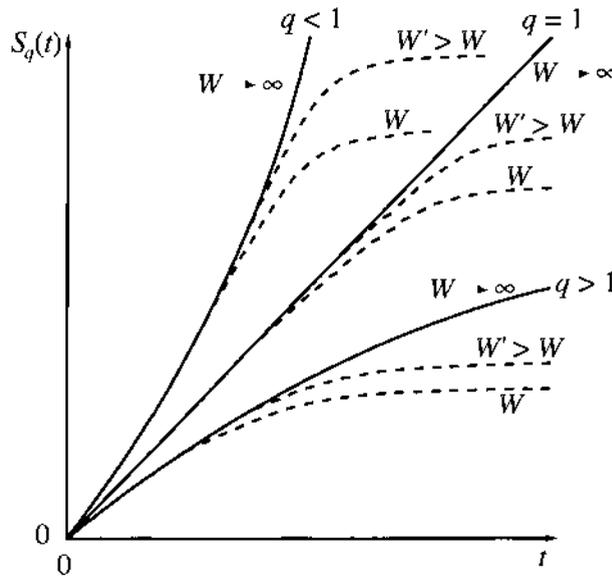


Figura 1.4: Representação esquemática de $S_q(t)$ para diferentes valores de q , para o caso de um espaço de fases caótico. Somente para $q = 1$ temos, no limite $W \rightarrow \infty$, uma taxa assintótica ($t \rightarrow \infty$) finita de produção de entropia K_1 ($K_q = 0$ para $q > 1$ e $K_q \rightarrow \infty$ para $q < 1$).

Na referência [50] foi suposto que nos casos unidimensionais o coeficiente de Lyapunov q -generalizado e a entropia de Kolmogorov-Sinai q -generalizada estejam relacionadas através da equação:

$$K_q = \begin{cases} \lambda_q & \text{se } \lambda_q > 0 \\ 0 & \text{nos outros casos} \end{cases} \quad (1.90)$$

Mais explicitamente, temos $K_1 = \lambda_1$ se $\lambda_1 \geq 0$ (e $K_1 = 0$ se o coeficiente máximo de Lyapunov $\lambda_1 < 0$). Mas se $\lambda_1 = 0$, então existe um valor especial de q tal que $K_q = \lambda_q$ se $\lambda_q \geq 0$ (e $K_q = 0$ se $\lambda_q < 0$). Também esta relação foi provada analiticamente para o limiar do caos de mapas unimodais unidimensionais [18] (veja o capítulo 2). Para o caso de mapas Hamiltonianos, a situação é mais complexa [52, 53, 56, 57], como veremos no capítulo 3.

1.5.3 Fundamentação dinâmica do ensemble canônico e platôs quase-estacionários

Um outro ponto fundamental é a ligação entre dinâmica e descrição estatística do equilíbrio macroscópico do sistema. Como citamos, este tema, já observado por Einstein [2] e que correspondia ao pensamento do próprio Boltzmann, teve bastante atenção na literatura (veja, por exemplo, [6] e referências sugeridas). Se de um lado o sucesso da dinâmica molecular é uma evidência clara *a posteriori* do fundamento dinâmico do ensemble microcanônico, técnicas dinâmicas que abordam configurações de ensemble canônico normalmente impõem a dinâmica *a priori* (como por exemplo os métodos Monte Carlo). De fato, no caso do ensemble canônico os fundamentos dinâmicos ainda precisam de ser aprofundados [3, 4, 5, 6]. No capítulo 4 veremos uma nova técnica numérica [58] que permite fundamentar, utilizando somente a segunda lei de Newton ($\mathbf{F} = m\mathbf{a}$), a distribuição térmica de equilíbrio de BG no próprio espaço Γ , para uma configuração de ensemble canônico de sistemas Hamiltonianos de muitos corpos com interação de curto alcance. Neste capítulo veremos também como no caso de interações de longo alcance surgem fenômenos anômalos que violam as previsões do formalismo de BG (efeito que no fundo deve ser esperado, já que a hipótese de caos molecular não é válida neste caso). Com efeito, dependendo das condições iniciais do sistema, no caso de longo alcance aparecem *platôs quase-estacionários* (que chamaremos também de *platôs meta-estáveis*) onde valores de grandezas macroscópicas, como por exemplo a energia cinética específica, não coincidem com as previsões da mecânica estatística ordinária [59, 60] (para uma discussão mais geral veja [61]). Notavelmente, platôs com características muito parecidas se evidenciam também em correspondência de dinâmicas complexas de mapas dissipativos [62, 63] e conservativos [64, 65, 66]. Nestes casos os platôs são associados a dimensões fractais não triviais no espaço de fases. Ao longo da tese analisaremos portanto as características destes platôs meta-estáveis e discutiremos as intrigantes analogias entre platôs que aparecem em modelos diferentes [63]. Além disso, através do estudo destas anomalias, tentaremos determinar os parâmetros q capazes de descrever macroscopicamente estes estados.

Capítulo 2

Sistemas dissipativos: mapas tipo logístico

Nesta seção trataremos de mapas (*aplicações*) unidimensionais do tipo do conhecido mapa logístico, chamados mapas unimodais. Apesar da lei de iteração destes mapas ser extremamente simples, a física a eles associada é muito rica e representa modelos experimentais como fluidos turbulentos, osciladores RCL, dispositivos acústicos, entre outros. Do ponto de vista teórico, eles permitem aplicar técnicas de grupo de renormalização em completa analogia com aquelas usadas em fenômenos críticos. É justamente através deste tipo de técnicas que foi possível provar, de modo exato, a validade do formalismo não-extensivo para $q \neq 1$ em vários pontos críticos onde o coeficiente clássico de Lyapunov se anula. Utilizando um desses resultados e introduzindo um ruído aditivo na equação do mapa, podem-se descrever fenômenos de relaxação em várias etapas, com o surgimento de platôs meta-estáveis que apresentam analogias com os que aparecem no estudo de sistemas vítreos.

2.1 Mapas de tipo logístico: um paradigma para o caos

O mapa logístico foi introduzido originalmente por P.F. Verhulst no 1845 para simular o crescimento de uma população numa área fechada. Trata-se de um mapa unidimensional de tempo discreto cuja lei de iteração é dada por

$$\bar{x}_{t+1} = r\bar{x}_t(1 - \bar{x}_t), \quad (2.1)$$

onde $\bar{x} \in [0, 1]$, $t = 0, 1, \dots$, e $r \in [1, 4]$. Através da transformação $\mu = r(r/4 - 1/2)$, $\bar{x} = (x - 1/2)/(r/4 - 1/2)$ esta lei de iteração é transformada na forma equivalente

$$x_{t+1} = f_\mu(x_t) \equiv 1 - \mu x_t^2, \quad (2.2)$$

onde $x \in [-1, 1]$, e $\mu \in [0, 2]$. Esta segunda forma é interessante porque é facilmente generalizada para outras classes de universalidade através da equação

$$x_{t+1} = f_{\mu,\zeta}(x_t) \equiv 1 - \mu|x_t|^\zeta, \quad (2.3)$$

onde a não-linearidade $\zeta > 1$ representa a classe de universalidade do mapa unimodal. Por mapa unimodal se entende uma qualquer função f contínua diferenciável que mapeia o intervalo $[-1, 1]$ nele mesmo, com um único máximo em $x = 0$, e que seja monotónica para $-1 \leq x \leq 0$ e $0 < x \leq 1$ ¹.

Em geral, um mapa d_M -dimensional $\mathbf{x}_{t+1} = \mathbf{M}(\mathbf{x}_t)$, com $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{d_M}$, é dito *conservativo* se preserve o volume no espaço de fases a cada iteração. O volume é preservado se e apenas se o determinante da sua matriz Jacobiana \mathbf{DM} é igual a um,

$$\det(\mathbf{DM}(\mathbf{x})) \equiv \det\left(\frac{\partial \mathbf{M}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}\right) = 1. \quad (2.5)$$

¹Na realidade, para exibir a estrutura de infinitas seqüências de bifurcações de forquilha a função f deve ter também derivada Schwarziana negativa em todo o intervalo $[-1, 1]$, onde a derivada Schwarziana de f , Sf , é definida como

$$Sf \equiv \frac{f'''}{f'} - \frac{3}{2} \left(\frac{f''}{f'}\right)^2, \quad (2.4)$$

veja, por exemplo, [8].

Se em alguma região do espaço de fases $\det(\mathbf{DM}(\mathbf{x})) < 1$, o mapa é dito *dissipativo*. É importante o fato que sistemas dissipativos são tipicamente caracterizados pela presença de um ou mais conjuntos *atratores* no espaço de fases. Esses são sub-conjuntos limitados do espaço de fases, definidos pelo fato que existem regiões de dados iniciais, com volume não nulo, que tendem assintoticamente aos atratores. Claramente, os mapas que estamos considerando neste capítulo são sistemas dissipativos.

No caso de mapas unidimensionais existe um único coeficiente Lyapunov, cuja definição se simplifica em²

$$\lambda(x_0) \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \left| \frac{df^{(t)}(x_0)}{dx_0} \right| = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \left| \prod_{i=0}^{t-1} f'(x_i) \right| = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \sum_{i=0}^{t-1} \ln |f'(x_i)|. \quad (2.6)$$

A figura 2.1 mostra o atrator e o coeficiente de Lyapunov do mapa logístico $\zeta = 2$ em função do parâmetro de controle do caos μ . Para μ menor (maior) do valor crítico $\mu_\infty \equiv 1.401155198\dots$, λ é tipicamente negativo (positivo). μ_∞ define a transição entre atrator regular e caótico e é chamado *limiar do caos*. No limiar do caos λ se anula. Note-se que a esquerda de μ_∞ o coeficiente de Lyapunov se anula também onde ocorre uma duplicação do atrator, o que acontece para $\mu = \mu_k$ ($k = 1, 2, \dots$) através do mecanismo da *bifurcação de forquilha*. Este mecanismo é conhecido como *rota para o caos via duplicação de período* e é evidenciado por sistemas físicos de várias origens. Note-se que esta região regular é caracterizada por ciclos de pontos fixos de período 2^k . Alguns destes ciclos, por valores especiais do parâmetro $\mu = \tilde{\mu}_k$, passam por $x = 0$. Estes ciclos são chamados *ciclos super-estáveis* e, como veremos, têm um papel importante no grupo de renormalização de Feigenbaum-Coulet-Tresser (FCT) [67, 68]. Na região caótica ($\mu > \mu_\infty$) existem janelas de periodicidade onde o Lyapunov é negativo. Estas janelas são introduzidas por uma *bifurcação tangente*, onde λ mais uma vez se anula, e são ligadas à *rota para o caos por intermitência de tipo I*. No parágrafo 2.2 analisaremos em detalhes estes importantes mecanismos e veremos que é possível deduzir, por específicos valores do parâmetro $q \neq 1$, um coeficiente de Lyapunov q -generalizado não nulo que descreve o comportamento dinâmico destes pontos críticos.

²Note-se a propriedade $\frac{d}{dx} f^{(2)}(x)|_{x_0} = \frac{d}{dx} f[f(x)]|_{x_0} = f'[f(x_0)]f'(x_0)$.

Resumimos agora algumas das características conhecidas da dinâmica dos mapas unimodais, que serão em parte utilizadas ao longo deste capítulo.

- Os valores μ_k , onde o número de pontos fixos do atrator muda de 2^{k-1} para 2^k , escala como

$$\mu_k = \mu_\infty - \text{const.} \delta^{-k}, \quad \text{para } k \gg 1. \quad (2.7)$$

- Isto vale também para os valores do parâmetro μ que definem os super-ciclos:

$$\tilde{\mu}_k = \tilde{\mu}_\infty - \text{const.}' \delta^{-k}, \quad \text{para } k \gg 1. \quad (2.8)$$

- As posições das janelas de periodicidade na região caótica escalam com o mesmo expoente δ e um valor diferente da constante.
- Os valores das distâncias d_k dos pontos em um 2^k -super-ciclo que são mais próximos de $x = 0$ são chamados *diâmetros* d_k :

$$d_k \equiv f_{\tilde{\mu}_k, C}^{(2^k-1)}(0). \quad (2.9)$$

A razão entre diâmetros é constante:

$$\frac{d_k}{d_{k+1}} = -\alpha \quad \text{para } k \gg 1. \quad (2.10)$$

- α e δ são conhecidas como constantes de Feigenbaum. No caso do mapa logístico $\zeta = 2$ elas valem

$$\delta = 4.6692016091\dots, \quad (2.11)$$

$$\alpha = 2.5029078750\dots. \quad (2.12)$$

- O limiar do caos do mapa logístico é dado por

$$\mu_\infty = \tilde{\mu}_\infty = 1.401155198\dots \quad (2.13)$$

- No limiar do caos o atrator constitui um conjunto de Cantor de dimensão fractal

$$d_f = 0.5338\dots. \quad (2.14)$$

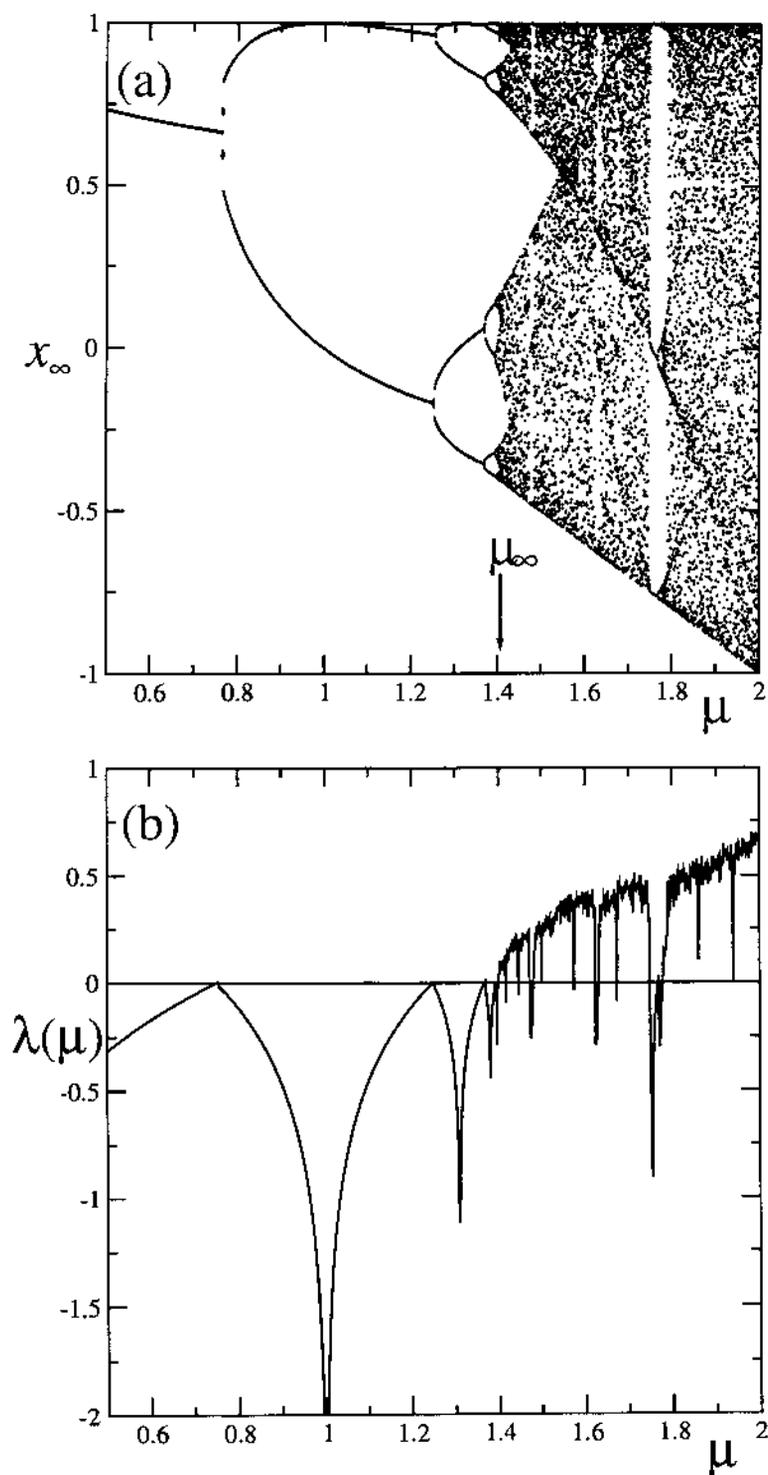


Figura 2.1: (a) Atrator do mapa logístico ($\zeta = 2$) em função de μ . O *limiar do caos* é definido em correspondência do valor crítico $\mu_\infty = 1.401155198\dots$ (b) Coeficiente de Lyapunov λ em função de μ .

2.1.1 Evidências experimentais dos mecanismos de rotas para o caos

Nesta seção descrevemos alguns aparatos experimentais que apresentam transições entre regimes regulares e caóticos com os mecanismos descritos pelos mapas unimodais. Esta descrição é somente de carácter ilustrativo, para aprofundamentos indicamos por exemplo [8] e referências ali sugeridas.

Um sistema físico que exhibe diferentes tipos de rota para o caos é o experimento de Bénard. Neste experimento uma camada de fluido, com coeficiente de expansão volumétrica positivo, é colocado entre duas lâminas horizontais, num campo gravitacional. A lâmina de baixo está a uma temperatura maior do que aquela de cima. A tendência do fluido esquentado em baixo da camada é de subir, enquanto que o fluido da parte de cima tende a descer, mas estes movimentos são contrastados pelas forças viscosas. Para pequenas diferenças de temperatura ΔT , a viscosidade consegue manter o fluido em repouso e a transmissão de calor se dá através de condução uniforme. O sistema se torna instável para um valor crítico do número de Rayleigh R (que é proporcional a ΔT), e se desenvolve um estado estacionário de “rolos de convecção”. Para valores de R ainda maiores se observa uma transição para um movimento caótico, acima de um segundo limiar crítico. Estes comportamentos dinâmicos podem ser observados medindo, através do efeito Doppler do espalhamento da luz, o espectro de potência da velocidade do fluido em várias direções. Dependendo dos parâmetros experimentais, este sistema exhibe várias rotas para o caos. Em particular, foram observadas sub-harmônicas de frequências $f/2$, $f/4$, $f/8$ e $f/16$, onde f é a frequência fundamental, em analogia com a cascata de duplicação de período que acontece no mapa logístico para $\mu < \mu_\infty$; e também sinais típicos de intermitência tipo I, que é associada às bifurcações tangentes. Veja, por exemplo, [8] para os detalhes.

Um outro sistema experimental que possibilita o estudo do comportamento caótico é um oscilador RCL não linear. Trata-se simplesmente de um circuito em série RCL com um gerador de potencial sinusoidal, onde o elemento não linear é introduzido por um diodo. O parâmetro de controle é constituído pelo valor da amplitude do potencial. Neste dispositivo.

o sinal de corrente gera séries temporais que correspondem às cascatas de bifurcações e às intermitências produzidas por mapas unimodais [8].

Como última ilustração, para ressaltar as propriedades de universalidade destes fenômenos, observamos que uma outra aparelhagem que exhibe a cascata de duplicação de período é dada por um reservatório de água irradiado por ondas sonoras de alta intensidade. O sinal caótico é produzido pelas próprias ondas sonoras depois de atravessar a água. Os elementos não lineares deste sistema são as bolhas cheias de vapor de água criadas pelos gradientes de pressão das ondas sonoras [8].

2.1.2 Paralelismo entre duplicação de período e transições de fases

Para descrever o fenômeno da cascata de bifurcações de forquilha, Coulet e Tresser [67] e, independentemente, Feigenbaum [68] criaram um grupo de renormalização que se revela extremamente poderoso para encontrar resultados analíticos associados à dinâmica dos mapas unimodais. Analisando, por concreteza, o caso do mapa logístico $\zeta = 2$, entraremos agora em alguns detalhes que serão úteis nas próximas seções.

Este grupo de renormalização se baseia na definição dos diâmetros d_k ,

$$d_k = f_{\tilde{\mu}_k}^{(2k-1)}(0), \quad (2.15)$$

onde, para simplificar as notações, escrevemos $f_{\tilde{\mu}_k, \zeta=2} \equiv f_{\tilde{\mu}_k}$. A Eq. (2.10) implica em

$$\lim_{k \rightarrow \infty} (-\alpha)^k d_{k+1} = d_1, \quad (2.16)$$

ou seja, a seqüência de iterados $f_{\tilde{\mu}_{k+1}}^{(2k)}(0)$ converge para d_1

$$\lim_{k \rightarrow \infty} (-\alpha)^k f_{\tilde{\mu}_{k+1}}^{(2k)}(0) = d_1. \quad (2.17)$$

Resultados numéricos para $x \neq 0$ sugerem que a *função rescalada* $f_{\tilde{\mu}_{k+1}}^{2k} \left[\frac{x}{(-\alpha)^k} \right]$ converge para uma função limite $g_1(x)$:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} (-\alpha)^k f_{\tilde{\mu}_{k+1}}^{2k} \left[\frac{x}{(-\alpha)^k} \right] = g_1(x). \quad (2.18)$$

O passo seguinte é construir uma família de funções $g_i(x)$ ($i = 0, 1, \dots$) relacionadas através de uma *transformação de duplicação* R . A família de funções $g_i(x)$ é dada por

$$g_i(x) = \lim_{k \rightarrow \infty} (-\alpha)^k f_{\tilde{\mu}_{k+i}}^{2k} \left[\frac{x}{(-\alpha)^k} \right]. \quad (2.19)$$

E se pode ver (por exemplo, [8]) que estas funções estão relacionadas através da transformação

$$g_{i-1}(x) = (-\alpha)g_i \left[g_i \left(-\frac{x}{\alpha} \right) \right] \equiv Rg_i(x). \quad (2.20)$$

O limite para $i \rightarrow \infty$ de $g_i(x)$,

$$g(x) \equiv \lim_{i \rightarrow \infty} g_i(x), \quad (2.21)$$

define o ponto fixo do operador de duplicação

$$g(x) = Rg(x) = (-\alpha)g \left[g \left(-\frac{x}{\alpha} \right) \right], \quad (2.22)$$

que é a *função universal de Feigenbaum* que define a universalidade de α através da relação

$$g(0) = (-\alpha)g [g(0)]. \quad (2.23)$$

A função universal de Feigenbaum pode ser aproximada numericamente e é dada por

$$g(x) = 1 - 1.52763 x^2 + 0.104815 x^4 - 0.0267057 x^6 + \dots \quad (2.24)$$

Este grupo de renormalização apresenta muitas analogias com técnicas usadas em fenômenos críticos. Exibimos, a título ilustrativo, a tabela 2.1 que serve como um dicionário relacionando estas duas áreas. Novamente, indicamos [8] para maiores detalhes.

Como veremos na próxima seção, essencialmente a mesma abordagem de grupo de renormalização permite tratar também as bifurcações de forquilha e tangente.

2.2 Bifurcações de forquilha e tangente

Uma classe de fenômenos onde o formalismo não-extensivo tem sido muito estudado recentemente é constituída pelo comportamento dinâmico de mapas unimodais em condições

Transições de fases	Duplicação de período
Funcional de Landau-Ginzburg $H = \int d^d x [c(\nabla\sigma)^2 + t\sigma^2 + u\sigma^4]$, com vetor de parâmetros $\mu = (c, t, u)$	Mapa unidimensional $f_\mu(x)$
Distância para o ponto crítico $t = T - T_c$	Distância para $\tilde{\mu}_\infty$ $\tilde{\mu} - \tilde{\mu}_\infty$
Parâmetro de ordem $\langle \sigma(x) \rangle$ (magnetização)	Coeficiente de Lyapunov $\lambda(\tilde{\mu})$ (muda de sinal em $\tilde{\mu}_\infty$)
Formação de blocos de spins \rightarrow transformação de grupo de renormalização R com ponto fixo H^* $R[H^*] = H^*$	Composição funcional \rightarrow operador de duplicação R com ponto fixo g $R[g] = g$

Tabela 2.1: Paralelismo entre duplicação de período e transições de fases.

críticas [16, 17, 18, 50, 69, 70, 71, 72, 73]. É este o caso dos pontos de bifurcação destes mapas [16]. Este tipo de estados críticos fornecem uma oportunidade excepcional de examinar explicitamente a estrutura de fundamentos matemáticos e as implicações físicas das suas propriedades do tipo lei de potência, invariantes por escala.

Como antecipado, as rotas para o caos de tipo duplicação de período e de intermitência (tipo I) são baseadas respectivamente nas bifurcações de forquilha e tangente [8]. As bifurcações de forquilha são o mecanismo para a cascata de duplicação de período das órbitas e o ponto de acumulação destas órbitas é o limiar do caos, que é uma órbita de período infinito. Já a bifurcação tangente é um mecanismo diferente que liga órbitas periódicas com o caos, onde a intermitência é um precursor do comportamento periódico [8]. Da mesma forma que no caso das transições de segunda ordem do equilíbrio ordinário, os pontos de bifurcação têm propriedades universais que podem ser obtidas através de técnicas de grupo de renormalização, que para os mapas unimodais são baseadas em composição funcional e rescalamento. Através desta abordagem, as propriedades universais *estáticas*

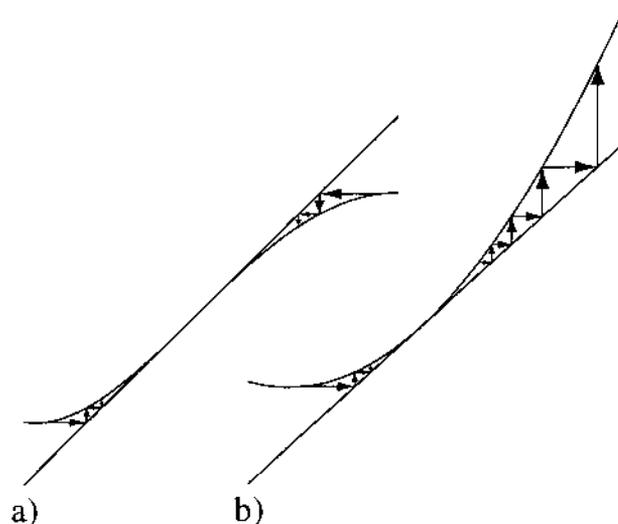


Figura 2.2: Forma esquemática de $f_{\mu, \zeta}^{(n)}$ em correspondência de bifurcações a) de forquilha e b) tangente.

derivadas dos mapas de ponto fixo e das suas equações de perturbação são bem entendidas [8]. No entanto, as propriedades *dinâmicas* e as suas implicações só agora estão sendo estudadas de maneira similar, usando a mesma abordagem de grupo de renormalização [74]. Nesta seção apresentamos resultados analíticos de grupo de renormalização para a dinâmica universal nos pontos de bifurcação de mapas unimodais de arbitrária não-linearidade $\zeta > 1$ [16].

A cada ponto de bifurcação a sensibilidade às condições iniciais ξ_t satisfaz uma lei de potência para grandes valores do tempo de iteração t , em contraste com o usual crescimento ou decaimento exponencial dos estados não críticos [50, 51]. Isto obviamente implica que o coeficiente de Lyapunov λ , que mede os comportamentos periódicos ($\lambda < 0$) ou caóticos ($\lambda > 0$), seja nulo. Como vimos na seção 1.5.1, a teoria não-extensiva oferece uma interessante alternativa para descrever a dinâmica nestes pontos críticos [50] através do coeficiente generalizado de Lyapunov λ_q , da Eq. (1.86). Robledo [74] recentemente apontou para uma clara conexão entre as soluções de ponto fixo do grupo de renormalização nos pontos de bifurcação dos mapas unimodais e as propriedades de extremização da entropia

não-extensiva. Nesta seção mostraremos soluções analíticas pela dinâmica e a sensibilidade às condições iniciais nas proximidades das bifurcações de ambos os tipos, e corroboraremos estes resultados numericamente [16]. Ao fazer isto, precedentes estimativas [50] do parâmetro não-extensivo q serão confirmadas e calcularemos o coeficiente generalizado de Lyapunov λ_q em termos dos parâmetros dos mapas [16].

Começamos lembrando o formalismo da abordagem de grupo de renormalização para os pontos de bifurcação dos mapas do tipo (2.3). A solução de Hu e Rudnick [8, 75] para a relação recursiva de grupo de renormalização de FCT³ para *bifurcação tangente* foi obtida como segue. Para a transição para uma janela de periodicidade de ordem n existem n pontos nos quais o mapa original $f_{\mu,\zeta}$ é tangente à linha de inclinação unitária. Escolhendo um destes pontos, trasladando a origem das coordenadas para este ponto e fazendo uma expansão da composição de n -vezes do mapa original, se obtém

$$f_{\mu,\zeta}^{(n)}(x) = x + u|x|^z + O(|x|^z), \quad (2.25)$$

onde u é o coeficiente principal da expansão e x são as coordenadas trasladadas. O mapa de ponto fixo $x' = f^*(x)$ do grupo de renormalização foi obtido como

$$x' = x[1 - (z - 1)u \operatorname{sgn}(x)|x|^{z-1}]^{-\frac{1}{z-1}}. \quad (2.26)$$

A expansão em série desta solução na coordenada x coincide com Eq. (2.25) nos dois termos de ordem mais baixa. Na referência [74] foi observado que o esquema precedente é aplicável também para as *bifurcações de forquilha*

$$df^{(2^k-1)}(x)/dx \Big|_{x=0} = -1 \quad (2.27)$$

de ordem $n = 2^k$, $k = 1, 2, \dots$, se o sinal de u é trocado para $x > 0$. Como ficará claro em seguida, note-se que o expoente z que aparece nas Eqs. (2.25) e (2.26) é diferente do expoente ζ no mapa original na Eq. (2.3).

³Note-se que, notavelmente, a lei de composição de grupo de renormalização utilizada para as bifurcações de forquilha e tangente coincide com aquela que descreve a cascata de duplicação de período e o limiar do caos.

Agora, tendo em consideração que o mapa de ponto fixo Eq. (2.26) satisfaz a propriedade do grupo de renormalização

$$f^*(f^*(x)) = \tilde{\alpha}^{-1} f^*(\tilde{\alpha}x) \quad (2.28)$$

com $\tilde{\alpha} = 2^{1/(z-1)}$, obtemos através de uma composição funcional repetida a seguinte propriedade notável

$$f^{*(m)}(x) = \frac{1}{m^{\frac{1}{z-1}}} f^*(m^{\frac{1}{z-1}}x), \quad m = 1, 2, \dots \quad (2.29)$$

Esta propriedade implica que, para um número total de iterações $t = mn$, $m = 1, 2, \dots$ com um dado inicial x_0 , suficientemente pequeno e para n e então t grande, o mapa de ponto fixo pode ser escrito como

$$x_t \equiv [f^{(n)}]^{(m)}(x_0) = x_0 [1 - (z-1)a \operatorname{sgn}(x_0) |x_0|^{z-1} t]^{-\frac{1}{z-1}}, \quad (2.30)$$

onde $a \equiv u/n$. Isto é equivalente a uma aproximação de tempo contínuo t da Eq. (2.26) obtida usando $x_t = x'$, $x_0 = x$ e $at = u$ [74]. Notamos também que introduzindo um índice adicional $l = 1, 2, \dots, n-1$, a mesma expressão vale para $x_{t+l} = f^{(mn+l)}(x_0)$, já que x_0 no lado direito desta equação pode ser substituído por $f^{(l)}(x_0)$. Em palavras, a evolução temporal do mapa original nas vizinhanças de um ponto de bifurcação da ordem n consiste num conjunto de n trajetórias da forma (2.30). Mas considerando ao invés a evolução temporal do mapa iterado n -vezes $f_{\mu, \zeta}^{(n)}$, esta é dada por uma única órbita da forma (2.30), mas agora com $t = m$ e $a = u$.

Pode também ser verificado que a Eq. (2.30) satisfaz a propriedade

$$dx_t/dx_0 = (x_t/x_0)^z, \quad (2.31)$$

e isto implica que a sensibilidade às condições iniciais $\xi_t \equiv \lim_{\Delta x_0 \rightarrow 0} (\Delta x_t / \Delta x_0)$ tem a forma

$$\xi_t(x_0) = [1 - (z-1)a \operatorname{sgn}(x_0) |x_0|^{z-1} t]^{-\frac{z}{z-1}}. \quad (2.32)$$

A comparação da Eq. (2.32) com a Eq. (1.86) fornece a identificação [76]

$$q = 2 - \frac{1}{z} \quad \text{and} \quad \lambda_q(x_0) = za \operatorname{sgn}(x_0) |x_0|^{z-1}. \quad (2.33)$$

Além disso, usando a forma conhecida [77] $\rho(x) \sim |x|^{-(z-1)}$ para a distribuição invariante de $f_{\mu,\zeta}^{(n)}$ da Eq. (2.25), temos que a média $\bar{\lambda}_q$ de $\lambda_q(x_0)$ em x_0 dá

$$\bar{\lambda}_q = za \operatorname{sgn}(x_0). \quad (2.34)$$

É interessante notar que esta média corresponde à q -extensão da expressão ordinária para o coeficiente de Lyapunov λ_1 , obtido como uma média de $\ln |df(x)/dx|$ em $\rho(x)$. Aqui temos

$$\bar{\lambda}_q = \int dx \rho(x) \ln_q \left| \frac{df^{(n)}(x)}{dx} \right|, \quad (2.35)$$

Analogamente, para o mapa iterado n -vezes $f_{\mu,\zeta}^{(n)}$ a sensibilidade às condições iniciais é caracterizada pelo coeficiente de Lyapunov generalizado

$$\bar{\Lambda}_q = n \bar{\lambda}_q = zu. \quad (2.36)$$

Na referência [74] foi proposta uma expressão alternativa para a sensibilidade às condições iniciais. Precisamente

$$\xi_t = [\exp_q(\lambda_q t)]^q \equiv [1 - (q-1)\lambda_q t]^{-\frac{q}{q-1}}, \quad (2.37)$$

como sugerido por uma notável similaridade entre a expressão da perturbação do grupo de renormalização para x_t e uma possível generalização da entropia de Kolmogorov-Sinai [74]. Usando esta forma, tem-se as seguintes identificações: $q = z$ e $\bar{\lambda}_q = a$. Note-se que se trata nada mais nada menos de uma das relações de rescalamentos apontadas na seção 1.2.1.

Prosseguimos agora mostrando resultados explícitos para o índice q e o coeficiente de Lyapunov generalizado $\bar{\lambda}_q$ pelas primeiras bifurcações de forquilha e tangente. Uma bifurcação de forquilha de ordem $n = 2^k$ (veja-se Fig. 2.2a) é caracterizada pelas seguintes condições

$$\begin{aligned} f_{\mu,\zeta}^{(2^k-1)}(y_c) &= y_c \quad (k = 1, 2, \dots), \\ \frac{df_{\mu,\zeta}^{(2^k-1)}}{dy} \Big|_{y=y_c} &= -1 \quad \text{e} \quad \frac{df_{\mu,\zeta}^{(2^k)}}{dy} \Big|_{y=y_c} = 1. \end{aligned} \quad (2.38)$$

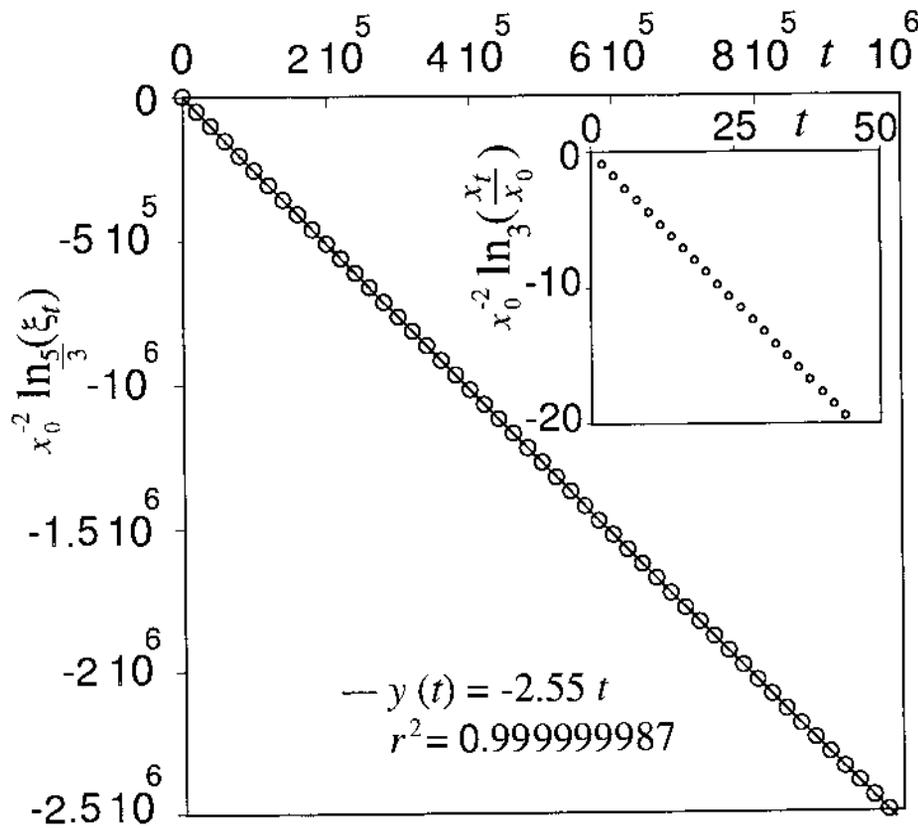


Figura 2.3: Insensibilidade fraca às condições iniciais pela primeira bifurcação de forquilha para $\zeta = 1.75$. A linha contínua para o q -logaritmo de ξ_t em função de t com $q = 5/3$ e inclinação $m = -2.55$ confirma o resultado analítico e os valores específicos previstos para q e λ_q por esta transição. A figura inserida mostra o comportamento correspondente para uma única trajetória.

Estas condições determinam os valores do parâmetro crítico μ_c e das 2^{k-1} posições críticas y_c . Uma translação das coordenadas ($x \equiv y - y_c$ e $x' = f_{\mu,\zeta}^{(2^k)}(y) - y_c$) e uma expansão em série produzem

$$f_{\mu,\zeta}^{(2^k)}(x) = x + u|x|^3 + O(x^3), \quad (2.39)$$

já que em correspondência destas transições vale sempre $d^2 f_{\mu,\zeta}^{(2^k)}/dx^2|_{x=0} = 0$, independentemente da não-linearidade ζ . O coeficiente u é dado então por $u = \pm(1/6)d^3 f_{\mu,\zeta}^{(2^k)}/dx^3|_{x=0}$, onde o sinal $+$ se aplica para $x > 0$ e o sinal $-$ para $x < 0$, e onde $d^3 f_{\mu,\zeta}^{(2^k)}/dx^3|_{x=0} < 0$. Como primeiro resultado obtemos que

$$z = 3 \quad \text{e} \quad q = 5/3 \quad (2.40)$$

pela sensibilidade às condições iniciais para todas as bifurcações de forquilha de qualquer não-linearidade ζ . Note-se que por qualquer valor de $x_0 \neq 0$ o argumento da função q -exponencial (2.32) é negativo, e isto, combinado com $q > 1$, implica que a bifurcação de forquilha exhibe uma *insensibilidade fraca* [50, 51] às condições iniciais para ambos os lados da posição crítica.

No caso da primeira bifurcação de forquilha ($k = 1$), a sua localização é dada por $\mu_c = (\zeta + 1)^\zeta / (\zeta^\zeta (\zeta + 1))$ e $y_c = \zeta / (\zeta + 1)$, enquanto o coeficiente u vale $u = \mp(\zeta^4 + 2\zeta^3 - 2\zeta - 1) / (6\zeta^2)$. Em conseqüência o coeficiente generalizado de Lyapunov para $f_{\mu,\zeta}^{(2)}$ depende de ζ e é dado por

$$\bar{\lambda}_q = -\frac{1}{2} \frac{\zeta^4 + 2\zeta^3 - 2\zeta - 1}{\zeta^2}. \quad (2.41)$$

Na Fig. 2.3 apresentamos resultados numéricos para a primeira bifurcação de forquilha com $\zeta = 1.75$. Estes resultados confirmam a predição analítica $\bar{\lambda}_q = -2.5466$. A Eq. (2.41) foi conferida para vários valores de ζ . A localização e o coeficiente da expansão para a segunda bifurcação de forquilha ($k = 2$) para valores genéricos de ζ são mais difíceis de obter analiticamente, mas como ilustração fornecemos os resultados para o mapa logístico ($\zeta = 2$). Temos $\mu_c = 5/4$ e as duas posições críticas são dadas por $y_c = 2(1 \pm \sqrt{2})/5$. Como conseqüência, $\bar{\lambda}_q$ para a primeira posição crítica vale

$$\bar{\lambda}_q = -3(250 + 125\sqrt{2})/4, \quad (2.42)$$

enquanto para a segunda vale

$$\bar{\lambda}_q = -3(250 - 125\sqrt{2})/4. \quad (2.43)$$

As condições que determinam o parâmetro crítico e as n posições críticas de uma bifurcação tangente de ordem n (veja Fig. 2.2b) são

$$f_{\mu,\zeta}^{(n)}(y_c) = y_c \text{ e } \left. \frac{df_{\mu,\zeta}^{(n)}}{dy} \right|_{y=y_c} = 1, \quad (2.44)$$

de modo que, executando a mesma mudança de coordenadas como antes, se obtém a expansão

$$f_{\mu,\zeta}^{(n)}(x) = x + u|x|^2 + O(x^2), \quad (2.45)$$

onde o coeficiente u é agora dado por $u = (1/2)d^2 f_{\mu,\zeta}^{(n)}/dx^2|_{x=0} > 0$. Temos então que

$$z = 2 \text{ e } q = 3/2 \quad (2.46)$$

para a sensibilidade às condições iniciais de todas às bifurcações tangentes de qualquer não-linearidade ζ . O lado esquerdo da bifurcação tangente exhibe, em analogia com o caso precedente, uma *insensibilidade fraca* às condições iniciais. Todavia, ao lado direito da bifurcação o argumento da função q -exponencial torna-se positivo. Este fato, junto com $q > 1$, implica numa *sensibilidade 'super-forte'* às condições iniciais, no sentido que o crescimento da sensibilidade às condições iniciais é mais que exponencial.

Mais uma vez usamos o mapa logístico $\zeta = 2$ como ilustração e escolhemos para a sua primeira bifurcação tangente ($n = 3$) em $\mu_c = 7/4$ uma das três posições críticas. $y_c = 0.031405\dots$. A determinação do coeficiente de expansão fornece $u = 15.608\dots$, de modo que para $f_{\mu,\zeta}^{(3)}$ o coeficiente generalizado de Lyapunov é

$$\bar{\lambda}_q = \pm 31.216\dots \quad (2.47)$$

para $x_0 \geq 0$. Na Fig. 2.4 representamos os resultados numéricos para o lado esquerdo desta bifurcação, enquanto em Fig. 2.5 mostramos a sensibilidade 'super-forte' às condições iniciais característica do lado direito das bifurcações tangentes.

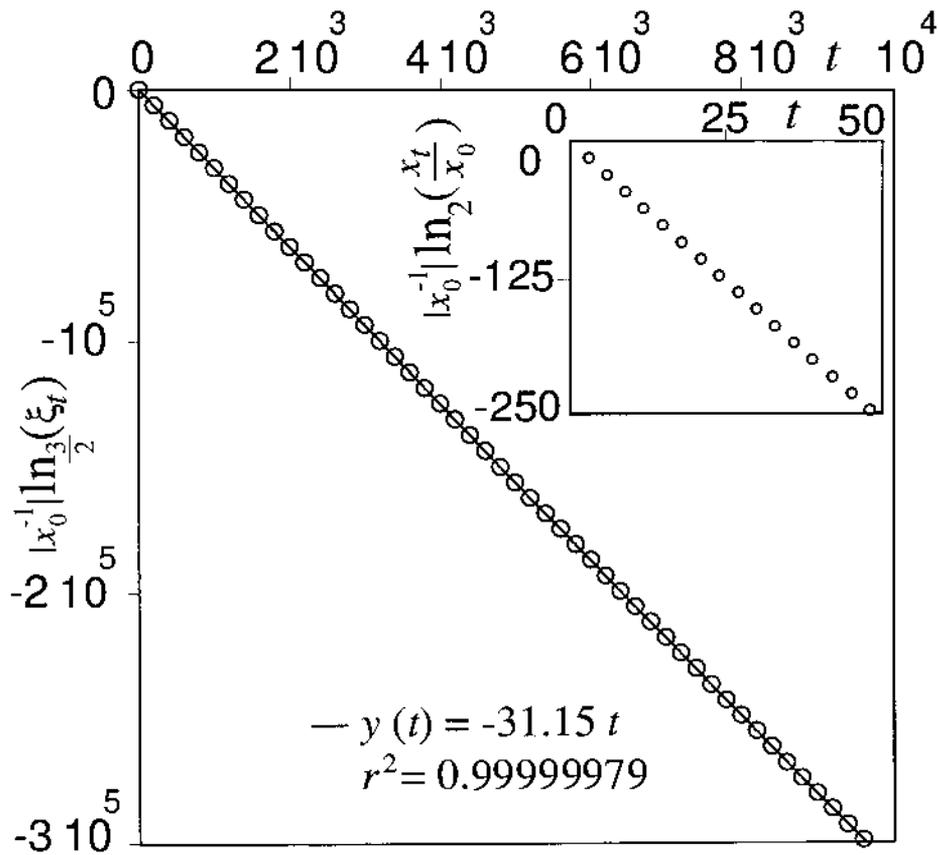


Figura 2.4: Insensibilidade fraca às condições iniciais ao lado esquerdo da primeira bifurcação tangente quando $\zeta = 2$. A linha reta para o q -logaritmo de ξ_t em função de t com $q = 3/2$ e inclinação $m = -31.15$ confirma os resultados analíticos e os valores específicos previstos para q e λ_q para esta transição. A figura inserida mostra o comportamento correspondente de uma única trajetória.

Obviamente, só para ordens muito baixas n das bifurcações e/ou valores especiais da não-linearidade ζ é possível obter soluções algébricas para as localizações das transições e para o coeficiente principal u da expansão em série. Mesmo assim, é sempre possível implementar métodos numéricos para determiná-los, e como consequência para encontrar o valor do coeficiente de Lyapunov generalizado $\bar{\lambda}_q$. Como mostrado nas Figs. 2.3-2.5, os cálculos numéricos *a priori* para os exemplos mais simples aqui escolhidos fornecem uma notável confirmação das previsões baseadas no grupo de renormalização para ambos q e λ_q .

2.3 O limiar do caos

Nesta seção descrevemos as propriedades universais associadas à dinâmica dos mapas unimodais no limiar do caos, que fornecem uma outra confirmação literal da teoria não-extensiva [17, 18]. Em correspondência deste estado, o ponto crítico mais proeminente destes mapas, mostraremos que o comportamento dinâmico é governado pela transformação de grupo de renormalização de FCT. Usando este resultado, veremos que ambas as trajetórias dinâmicas e a sensibilidade às condições iniciais exibem um comportamento de lei de potência caracterizado por funções q -exponenciais, que serão determinadas analiticamente. Mostraremos também que a conjectura [50] da q -generalização da identidade de Pesin entre a taxa de produção de entropia e o coeficiente de Lyapunov vale de forma exata no limiar do caos [18]. Além do próprio valor intrínseco como meio para estudar a dinâmica na vizinhança de estados caóticos, este resultado implica a importante consequência que a entropia não-extensiva é apta a descrever específicas situações físicas não atingidas pela entropia clássica de BG. Estes resultados analíticos serão corroborados por determinações numéricas *a priori*, baseadas somente na lei de iteração do mapa. Para este objetivo, usaremos novamente o mapa logístico $\zeta = 2$ como exemplo ilustrativo.

Lembramos que em correspondência do limiar do caos, ponto de acumulação da cascata de bifurcações de forquilha, o coeficiente clássico de Lyapunov se anula. Como apontado em [17], o grupo de renormalização de FCT, originalmente concebido para descrever as pro-

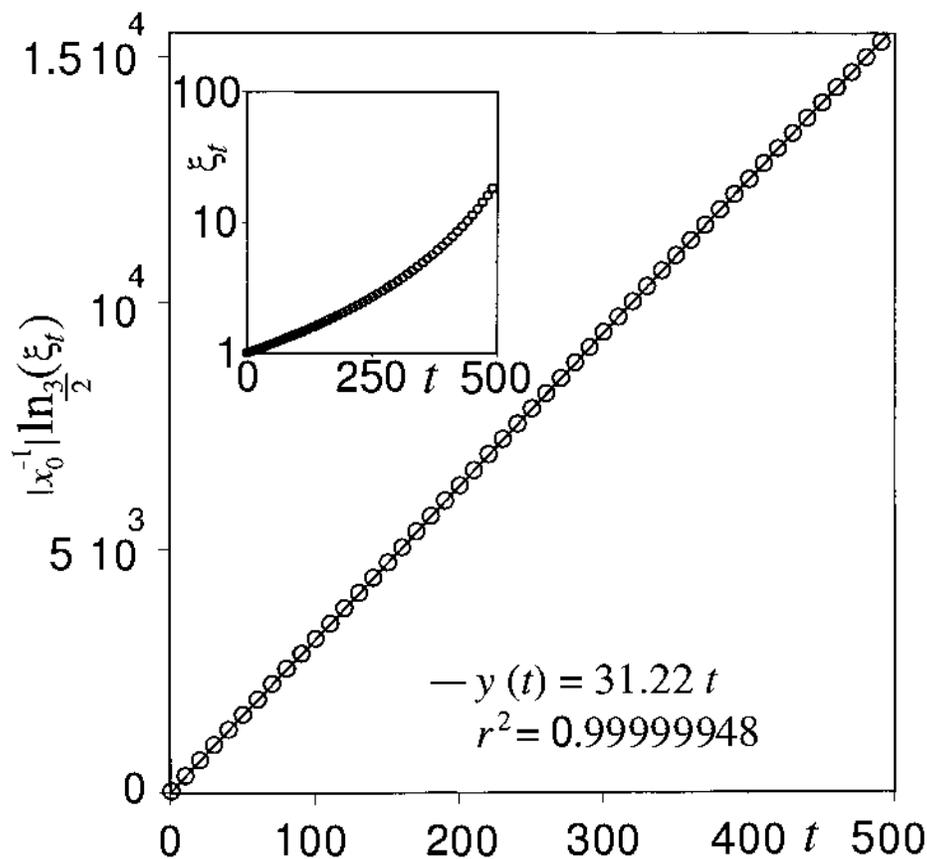


Figura 2.5: Sensibilidade ‘super-forte’ às condições iniciais ao lado direito da primeira bifurcação tangente quando $\zeta = 2$. A linha reta para o q -logaritmo de ξ_t em função de t com $q = 3/2$ e inclinação $m = 31.22$ confirma o resultado analítico e os valores específicos previstos por q e λ_q para esta transição. Por motivo de comparação a figura inserida mostra o logaritmo ξ_t em função de t .

priedades estáticas desta cascata de bifurcações, pode também ser utilizado para descrever o comportamento dinâmico no limiar do caos. Para fazer isto será suficiente considerar o valor absoluto dos diâmetros, portanto, por simplicidade, em seguida d_k significa $|d_k|$. Por uma razão que será logo clara, nesta seção mudamos a notação da variável temporal chamando-a τ . de modo que, por exemplo, a lei de iteração do mapa logístico será escrita como

$$x_{\tau+1} = f_{\mu_\infty,2}(x_\tau) \equiv 1 - \mu_\infty x_\tau^2. \quad (2.48)$$

Na Fig. 2.6 mostramos o valor absoluto das posições $x_\tau \equiv \left| f_{\mu_\infty,2}^{(\tau)}(x_{in}) \right|$ de duas trajetórias do mapa logístico no limiar do caos em escala logarítmica. Uma corresponde à condição inicial $x_{in} = 0$; e a outra a $x_{in} \simeq 0.56023\dots$, nas proximidades de um *repulsor*, a solução instável da equação $x = 1 - \mu_\infty x^2$. A primeira trajetória representa o atrator de Feigenbaum, um conjunto multifractal de dimensão $d_f = 0.5338\dots$, enquanto a segunda mostra um transiente de longa duração antes de cair no atrator. Na referência [17] foi observado que a trajetória que descreve o atrator de Feigenbaum com $x_{in} = 0$ consiste em uma série de subsequências monotônicas interligadas entre elas e caracterizadas pelo mesmo decaimento segundo uma lei de potência. Estas subsequências são geradas pelas subsequências temporais

$$\tau_k = (2k + 1)2^{n-k}. \quad (2.49)$$

com $k = 0, 1, \dots$ e $n \geq k$ (as primeiras posições, definidas por $\tau = 2k + 1$, das primeiras 8 subsequências podem ser identificadas entre os iterados etiquetados na Fig. 2.6)

Todas as subsequências exibem uma sensibilidade às condições iniciais do tipo q -exponencial. Para chegarmos neste resultado analisamos primeiramente somente a primeira subsequência. A primeira subsequência ($k = 0$) pode ser expressa na forma de uma q -exponencial usando os diâmetros dos super-ciclos abordados pelo grupo de renormalização de FCT. Consideramos a transformação de duplicação R aplicada n vezes ao mapa de ponto fixo $g(x)$:

$$g(x) = R^{(n)}g(x) \equiv \alpha^n g^{(2^n)}(x/\alpha^n). \quad (2.50)$$

Queremos determinar as posições nos tempos $\tau_0 = 2^n$ da trajetória com $x_{in} = 0$. Já que

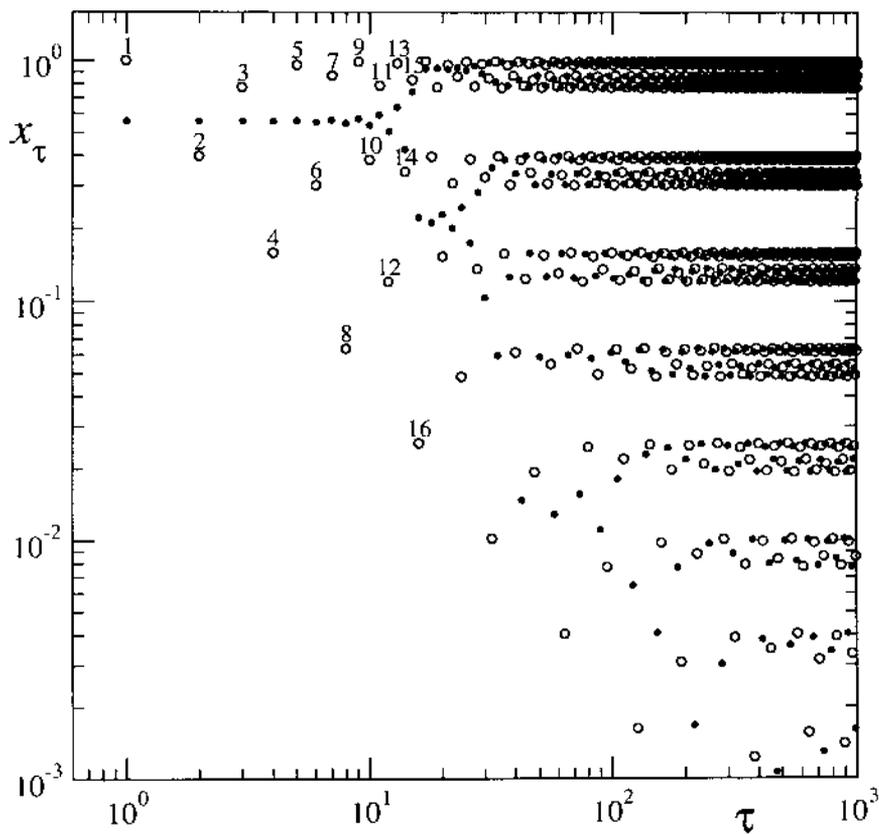


Figura 2.6: Valor absoluto de duas trajetórias para μ_∞ em escala logarítmica. Círculos vazios correspondem a $x_{in} = 0$ (os números etiquetam os tempos $\tau = 1, \dots, 16$). Pontos correspondem a $x_{in} \simeq 0.56023\dots$, na proximidade de um repulsor, a solução instável da equação $x = 1 - \mu_\infty x^2$.

$g(0) = 1$, temos $g^{(2^n)}(0) = \alpha^{-n}$, e, como $d_n/d_{n+1} = \alpha$ com $d_0 = 1$ implica em $d_n = \alpha^{-n}$. temos também que $d_n = g^{(2^n)}(0)$. Ou seja, obtemos que os diâmetros d_n correspondem às posições x_{2^n} . Este resultado pode ser expresso em termos de uma q -exponencial se introduzirmos uma translação de uma unidade da variável temporal $t_0 = \tau_0 - 1 = 2^n - 1$, e rearranjamos α^{-n} como $(1 + t_0)^{-\ln \alpha / \ln 2}$. Temos portanto

$$x_{t_0} = \exp_Q(\Lambda_Q t_0) \quad (2.51)$$

com $Q = 1 + \ln 2 / \ln \alpha$ e $\Lambda_Q = -\ln \alpha / \ln 2$. A expressão pela sensibilidade às condições iniciais pode ser derivada através da seguinte propriedade chave:

$$g^{(2^n)}(d_j) = \frac{g(0)}{\alpha^n} - \frac{g''(0)}{2\alpha^{2j-n}} = d_n - 1.52763 d_{2j-n}, \quad n \leq j, \quad (2.52)$$

válida por grandes valores de $j \in \mathbb{N}$. Para provar esta relação primeiro note-se que $g^{(2^n)}(d_j) = g^{(2^n+2^j)}(0) = \alpha^{-n} g^{(2^{j-n+1})}(0)$, ou, já que $g^{(2^{j-n+1})}(0) = g(d_{j-n})$, temos $g^{(2^n)}(d_j) = \alpha^{-n} g(d_{j-n})$. Esta igualdade, junto com $g(d_{j-n}) \simeq 1 - 1.52763 d_{j-n}^2 = 1 - 1.52763 \alpha^{2n-2j}$ produz Eq. (2.52). Agora, a distância entre as posições $x_{2^n}(d_j) = g^{(2^n)}(d_j)$ e $x_{2^n}(d_i) = g^{(2^n)}(d_i)$ no tempo $\tau_0 = 2^n$ pode ser escrita graças à Eq. (2.52) como $x_{2^n}(d_j) - x_{2^n}(d_i) = [x_{2^0}(d_j) - x_{2^0}(d_i)]\alpha^n$, ou, usando o a tempo translado $t_0 = 2^n - 1$ como

$$x_{t_0}(d_j) - x_{t_0}(d_i) = [x_0(d_j) - x_0(d_i)]\alpha^n. \quad (2.53)$$

A sensibilidade ξ_{t_0} , definida como

$$\xi_{t_0} \equiv \lim_{|\Delta x_0| \rightarrow 0} |x_{t_0}(d_j) - x_{t_0}(d_i)| / |x_0(d_j) - x_0(d_i)| \quad (2.54)$$

(onde $\lim_{|\Delta x_0| \rightarrow 0}$ é equivalente a $\lim_{i,j \rightarrow \infty, i \neq j}$), pode ser escrita, considerando $\alpha^n = (1 - t_0)^{\ln \alpha / \ln 2}$, como a q -exponencial

$$\xi_{t_0} = \exp_q(\lambda_q t_0), \quad (2.55)$$

onde

$$q = 1 - \frac{\ln 2}{\ln \alpha} = 0.2445\dots \quad \text{e} \quad \lambda_q = \frac{\ln \alpha}{\ln 2} = 1.3236\dots \quad (2.56)$$

Note-se que novamente aparece uma das relações da seção 1.2.1: $q = 2 - Q$, já que $\exp_q(y) = 1 / \exp_Q(-y)$. Na Fig. 2.7(b) mostramos o q -logaritmo da função (2.55) para a primeira

subseqüência ($k = 0$), junto com os dados de uma simulação numérica. O resultado para o limite superior é uma linha reta com uma inclinação muito próxima a $\lambda_q = 1.3236\dots$. Na parte (a) da mesma figura, a título ilustrativo mostramos que no caso de caos forte (com $\mu = 2$), o crescimento de ξ é exponencial com um coeficiente de Lyapunov igual a $\lambda = \ln 2$.

Este primeiro resultado pode ser estendido consideravelmente. Com efeito, todas as subseqüências τ_k exibem uma sensibilidade às condições iniciais dada por uma q -exponencial com o mesmo parâmetro q e um coeficiente de Lyapunov generalizado $\lambda_q^{(k)}$ que depende da subseqüência. Primeiro notamos que *todas as trajetórias* com $x_{in} < \alpha^{-m}$, $m = n - k$, são dadas por

$$x_{\tau_k} \equiv |g^{(\tau_k)}(x_{in})| \simeq \frac{g_k(0)}{\alpha^m} + \frac{g_k''(0)}{2\alpha^{-m}} x_{in}^2, \quad (2.57)$$

onde foram desprezados termos da ordem $O(\alpha^{3m} x_{in}^4)$. O ponto chave para demonstrar esta relação é notar que ambas $g(x)$ e $g_k(x) \equiv g^{(2k+1)}(x)$ são solução da transformação de duplicação $Rf(x) \equiv \alpha f(f(x/\alpha))$. Eq. (2.57) é obtida considerando os primeiros dois termos da expansão em série de $g_k(x)$, Eq. (2.23), usando depois $g_k(x) = \alpha^m g_k^{(2^m)}(x/\alpha^m)$ e a mudança de variáveis $x_{in} \equiv \alpha^{-m}x$. Considerando um par de condições iniciais y_{in} e x_{in} na Eq. (2.57) temos um resultado parecido com (2.53):

$$x_{\tau_k}(y_{in}) - x_{\tau_k}(x_{in}) = [x_{2k+1}(y_{in}) - x_{2k+1}(x_{in})]\alpha^m \quad (2.58)$$

Para cada subseqüência k , a sensibilidade às condições iniciais ξ_{t_k} , definida como

$$\xi_{t_k} \equiv \lim_{|y_{in} - x_{in}| \rightarrow 0} \frac{|x_{t_k}(y_{in}) - x_{t_k}(x_{in})|}{|x_{t_k=0}(y_{in}) - x_{t_k=0}(x_{in})|}, \quad (2.59)$$

pode ser escrita, usando o tempo translado

$$t_k \equiv \tau_k - 2k - 1 \quad (n \geq k), \quad (2.60)$$

e observando que $\alpha^m = (1 + t_k/(2k + 1))^{\ln \alpha / \ln 2}$, como a q -exponencial

$$\xi_{t_k} = \exp_q [\lambda_q^{(k)} t_k], \quad (2.61)$$

onde

$$q = 1 - \frac{\ln 2}{\ln \alpha} \quad \text{e} \quad \lambda_q^{(k)} = \frac{\ln \alpha}{(2k + 1) \ln 2}. \quad (2.62)$$

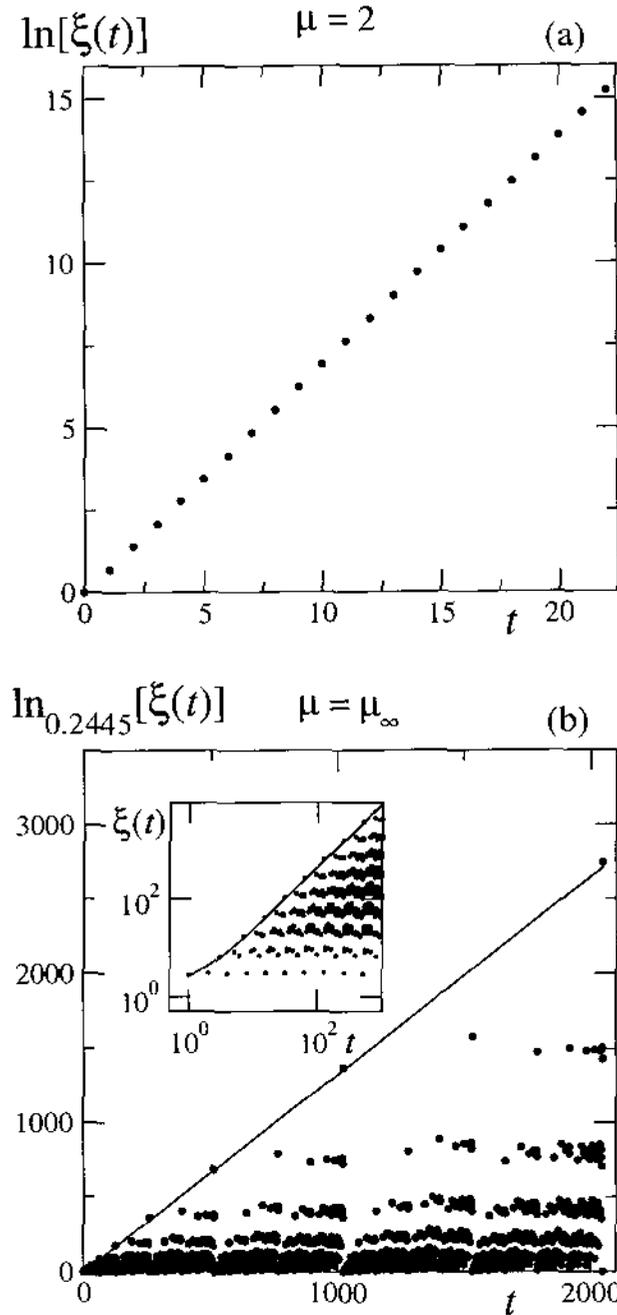


Figura 2.7: Sensibilidade às condições iniciais para o mapa logístico ($\zeta = 2$). Os pontos representam $\xi(t)$ para dois dados iniciais em $x_0 = 1/2$ e $\delta x_0 \sim 10^{-8}$ (a), e $x_0 = 0$ e $\delta x_0 10^{-8}$ (b). Para $\mu = 2$ o gráfico log-linear mostra um crescimento linear com uma inclinação $\lambda = \ln 2$. Para $\mu = \mu_\infty$ o gráfico q -log-linear mostra um crescimento linear da seqüência do limite superior (seqüência $k = 0$). A linha contínua é a função em Eq. (2.55), com $q = 0.2445\dots$ e $\lambda_q = \ln \alpha / \ln 2 = 1.3236\dots$. Na figura inserida em (b) os mesmos dados são representados em escala log-log.

Temos que ressaltar que, por causa da expansão em série, estas equações valem até um certo tempo $T = 2^N$, que depende dos dados iniciais: $x_{in} < \alpha^{-N}$ (veja a Eq. (2.57)).

A construção anterior vale nas vizinhanças de $x_{in} = 0$. Notamos porém que qualquer que seja o dado inicial no intervalo $[-1, 1]$, depois de um certo número de iterações a sua trajetória passa nas vizinhanças de $x = 0$, que pertence ao atrator. Estes resultados têm portanto valor geral, a menos de um oportuno rescalamento temporal.

Passamos agora a analisar a produção de entropia. Para isto consideramos um *ensemble* de \mathcal{N} trajetórias com posições iniciais x_{in} uniformemente distribuídas ao longo do intervalo $[1-l, 1]$, onde $1-l \leq g^{(3)}(0)$. Uma partição arbitrária de $[1-l, 1]$ é composta de um certo número W de intervalos que não se intersectam, de comprimento l_i , $i = 1, 2, \dots, W$, com $l = \sum_i l_i$. Para l suficientemente pequeno, depois de $\tau_k = (2k+1)2^{n-k}$ iterações os comprimentos l_i são transformados, em concordância com a Eq. (2.58), em $l_i^{(\tau_k)} = \alpha^m l_i$. Como temos também $l^{(\tau_k)} = \alpha^m l$, observamos que as razões dos intervalos permanecem constantes, ou seja, $l_i/l = l_i^{(\tau_k)}/l^{(\tau_k)}$. Concluindo, o número inicial de trajetória no interior de cada intervalo $\mathcal{N}l_i/l$ permanece fixo para todos os tempos $\tau < T$, com a consequência que a distribuição original fica uniforme para todos os tempos $\tau < T$. Esta conclusão é obviamente consistente com a análise que leva à Eq. (2.61).

Podemos agora calcular a taxa de produção de entropia. Isto é realizado de uma maneira mais simples usando uma partição de W células de mesmo tamanho l . A Fig. 2.8 apresenta de modo evidente a constância no tempo da uniformidade da distribuição. Esta figura mostra, em escala logarítmica, a evolução temporal de uma distribuição $p_i(\tau)$ de posições de um *ensemble* de trajetórias do mapa logístico no limiar do caos, começando de uma distribuição uniforme $p_i(1)$ de posições iniciais contidas dentro de uma única célula de tamanho l adjacente a $x = 1$. Se denotarmos com W_{t_k} o número de células que o *ensemble* ocupa ao tempo translado t_k e com Δx_{t_k} o comprimento total do intervalo que estas células adjacentes formam, temos $W_{t_k} = \Delta x_{t_k}/l$ e no limite $l \rightarrow 0$ (já que $W_{t_k} = (\Delta x_{t_k}/\Delta x_{t_k=0})(\Delta x_{t_k=0}/l)$) obtemos o resultado notavelmente simples

$$W_{t_k} = \xi_{t_k}. \quad (2.63)$$

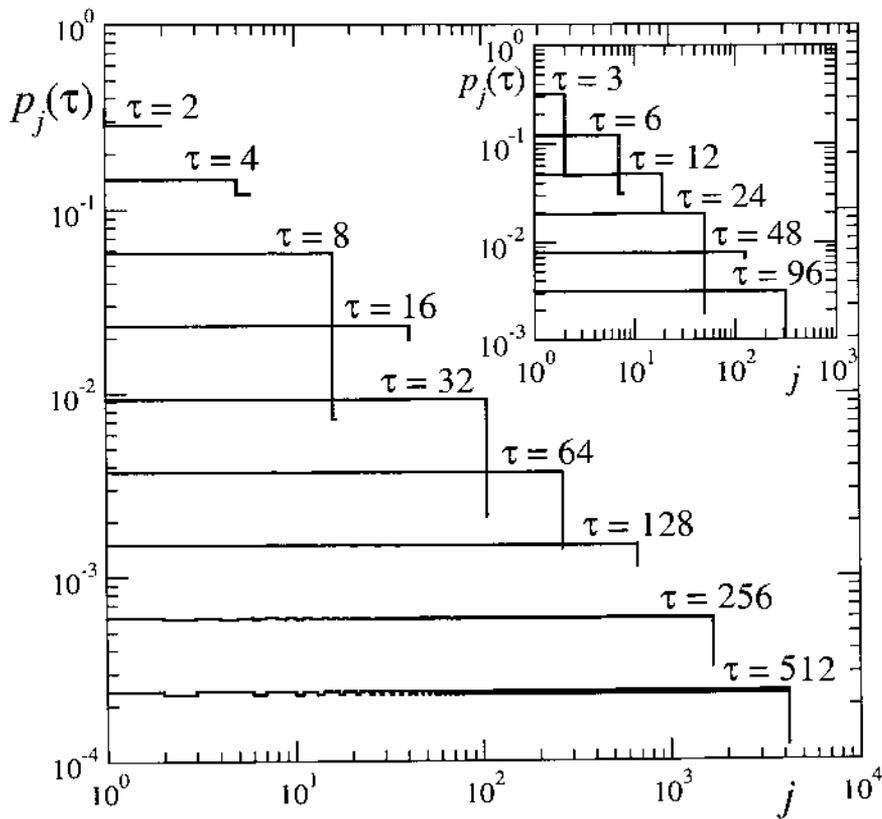


Figura 2.8: Evolução temporal, em escala logarítmica, de uma distribuição $p_j(\tau)$ de trajetórias do mapa logístico em μ_∞ . As posições iniciais são contidas dentro de uma célula adjacente a $x = 1$ e j conta a locação consecutiva das células ocupadas ao tempo τ . O tempo de iteração é mostrado pelas primeiras duas subsequências ($k = 0, 1$).

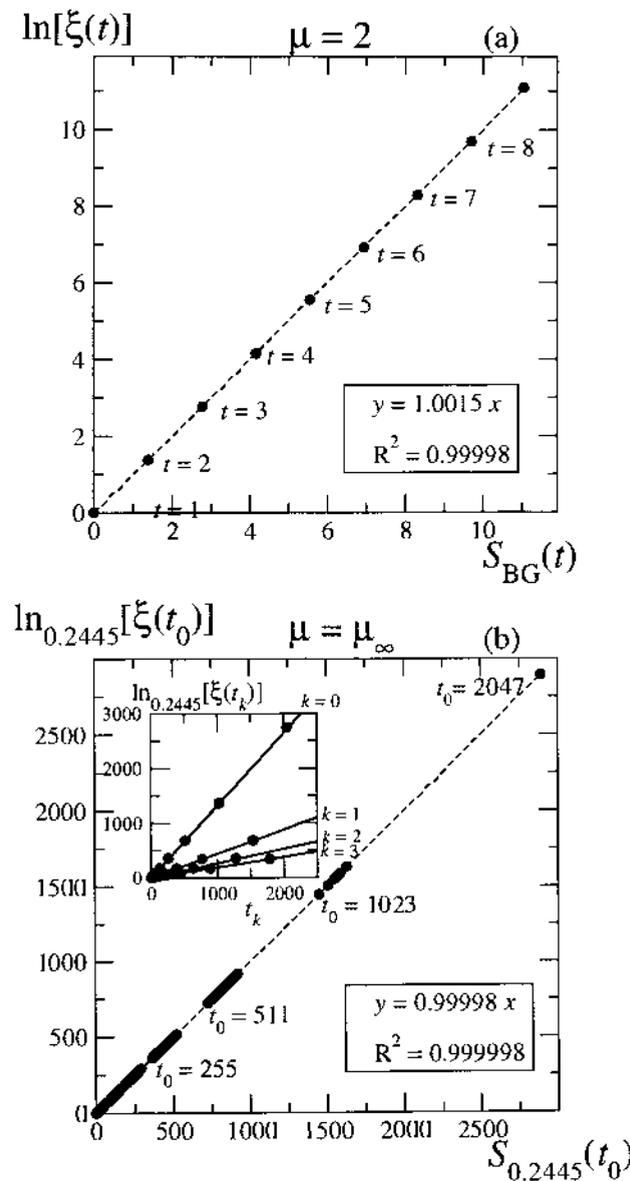


Figura 2.9: Confirmação numérica (em círculos cheios) da igualdade de Pesin generalizada $K_q^{(k)} = \lambda_q^{(k)}$ para o mapa logístico em μ_∞ . No eixo vertical representamos o q -logaritmo de ξ_{t_k} (igual a $\lambda_q^{(k)} t$) e no eixo horizontal S_q (igual a $K_q^{(k)} t$). Em ambos os casos $q = 1 - \ln 2 / \ln \alpha = 0.2445\dots$. As linhas tracejadas são um ajuste linear. (a) Para $\mu = 2$ a igualdade é obtida usando o formalismo de BG , $q = 1$; enquanto (b) no limiar do caos tem que ser utilizado $q = 0.2445\dots$. Os dados numéricos em (b) são obtidos fazendo uma partição do intervalo $[-1, 1]$ em células do mesmo tamanho 10^{-9} e considerando uma distribuição uniforme de 10^5 pontos dentro do intervalo $[0, 10^{-9}]$ como *ensemble* inicial. ξ é calculada utilizando os extremos desta distribuição. Uma configuração parecida fornece os resultados em (a). Na figura inserida em (b) as linhas contínuas representam o resultado analítico Eq. (2.61).

Como a distribuição é uniforme, e lembrando a Eq. (2.61) para ξ_{t_k} , a entropia não-extensiva é dada por

$$S_q(t_k) = \ln_q W_{t_k} = \lambda_q^{(k)} t_k, \quad (2.64)$$

Lembrando portanto a definição de entropia de Kolmogorov-Sinai q -generalizada (1.89),

$$S_q(t_k) \equiv K_q^{(k)} t_k, \quad (2.65)$$

temos a generalização da igualdade de Pesin

$$K_q^{(k)} = \lambda_q^{(k)}. \quad (2.66)$$

O resultado numérico mostrado em Fig. 2.9(b) substancia e confirma de forma evidente a validade da igualdade de Pesin q -generalizada para o mapa logístico em μ_∞ . Novamente, a título ilustrativo, na parte (a) da figura mostramos que a mesma igualdade vale para o caso de caos forte (com $\mu = 2$) usando o formalismo tradicional.

Para concluir esta discussão em relação ao limiar do caos, é importante mencionar que um valor não trivial $q(\zeta)$ (com $q(2) = 0.2445\dots$) pode ser obtido da dinâmica microscópica pelo menos através de *quatro* maneiras diferentes. Estas são:

- (i) sensibilidade às condições iniciais, como discutido anteriormente e em [17, 50, 69];
- (ii) análise de geometria multifractal, usando

$$\frac{1}{1 - q(\zeta)} = \frac{1}{\alpha_{min}(\zeta)} - \frac{1}{\alpha_{max}(\zeta)} = \frac{(\zeta - 1) \ln \alpha(\zeta)}{\ln 2}, \quad (2.67)$$

cujos detalhes podem ser encontrados em [70];

- (iii) produção de entropia por unidade de tempo, como mostrado acima e em [18, 71];
- (iv) relaxação associada com uma restrição da medida de Lebesgue, como se pode ver em [73] (veja também [72]).

2.4 Platôs quase-estacionários no mapa logístico

Nesta seção apresentamos um mecanismo dinâmico muito interessante que, como veremos também nos próximos capítulos, pode representar uma das chaves de aplicabilidade da mecânica estatística não-extensiva: a estrutura de platôs meta-estáveis ou quase-estacionários. De fato, recentemente foi apontado [62, 63] que fenômenos como a relaxação em dois passos e o envelhecimento (*aging*), típicos por exemplo de materiais vítreos, podem ser exibidos na dimensão mais baixa possível. Precisamente através de um mapa unimodal, por exemplo o mapa logístico, com *ruído aditivo*:

$$x_{\tau+1} = 1 - \mu x_{\tau}^2 + \tilde{\xi}_{\tau}\sigma, \quad \tau = 0, 1, \dots, \quad x \in [-1, 1], \quad \mu \in [0, 2], \quad (2.68)$$

onde $\tilde{\xi}_{\tau}$ (para não ser confundido com a sensibilidade às condições iniciais) é um ruído Gaussiano delta-correlacionado, $\langle \tilde{\xi}_{\tau} \rangle_{\xi} = 0$, $\langle \tilde{\xi}_{\tau} \tilde{\xi}_{\tau'} \rangle_{\xi} = \delta_{\tau\tau'}$, e σ mede a intensidade do ruído. Como vimos, para $\sigma = 0$ o limiar do caos $\mu = \mu_{\infty}$ é constituído por um conjunto de Cantor de dimensão $d_f = 0.5338\dots$ e fornece um exemplo onde a dinâmica é associada de forma exata ao formalismo não-extensivo [17, 18]. Em seguida focamos a nossa atenção na subsequência principal $\tau_0 = 2^n$ obtida para $x_{in} = 0$.

Na Fig. 2.10(a) representamos novamente o valor absoluto das órbitas representantes o atrator de Feigenbaum e uma trajetória nas proximidades de um repulsor para o caso $\sigma = 0$ (veja a Fig. 2.6), juntos desta vez com duas outras órbitas correspondentes a ruídos $\sigma = 10^{-3}$ e $\sigma = 10^{-6}$. Mais uma característica importante da Fig. 2.10(a) é que o logaritmo das posições do atrator aparece claramente dividido em um número infinito de bandas horizontais equidistantes. No espaço vazio entre cada dupla de bandas estão posicionados os pontos repulsores. No limiar do caos do mapa logístico com $\sigma \neq 0$ a dinâmica é governada por dois fenômenos em competição: de um lado a ação do ruído tende a levar os iterados fora das bandas; do outro a instabilidade nas vizinhanças dos repulsores traz as posições de volta para as bandas do atrator. Quando a intensidade do ruído é suficientemente grande para preencher o afastamento entre duas bandas, os iterados podem pular de uma banda para a outra (veja as linhas contínuas e tracejadas

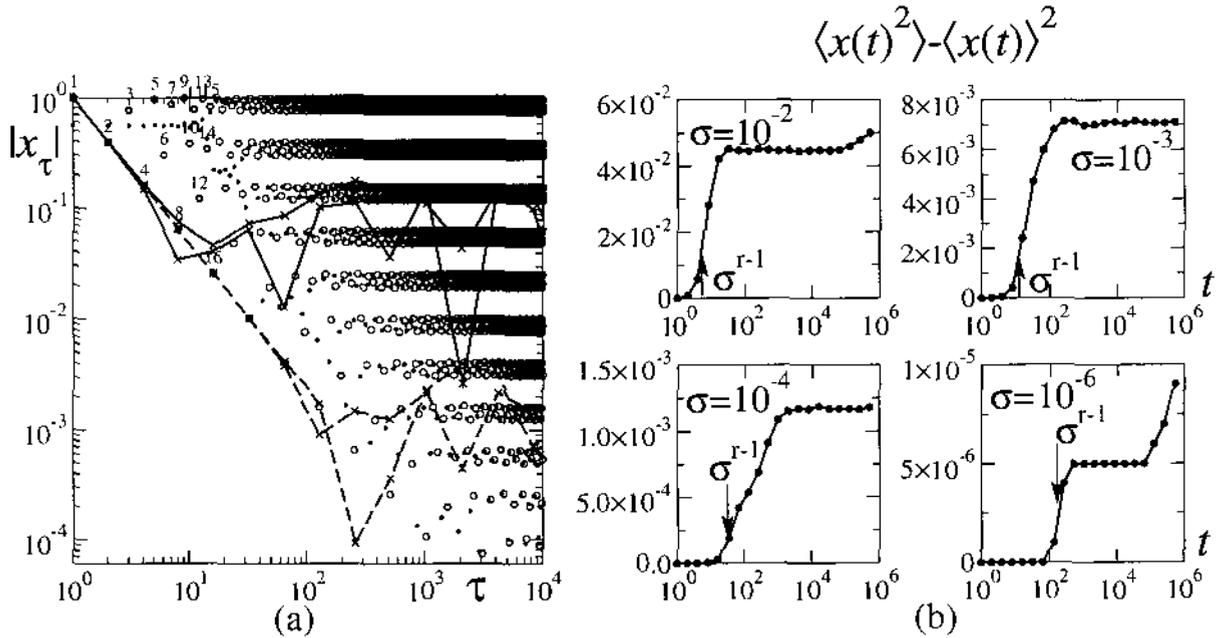


Figura 2.10: (a) Estrutura do espaço de fasces do mapa logístico com e sem ruído aditivo. Círculos vazios correspondem ao atrator em $\mu = \mu_\infty$ para $\sigma = 0$, obtidos iterando $x_{in} = 0$ (os números etiquetam os tempos $\tau = 1, \dots, 16$). Pequenos pontos correspondem a $x_0 = 0.56023$, nas proximidades de um repulsor, a solução instável de $x = 1 - \mu_c x^2$. Linhas contínuas (tracejadas) representam duas trajetórias para $\mu = \mu_\infty$ e $\sigma = 10^{-3}$ ($\sigma = 10^{-6}$). (b) Estrutura de platôs. Evolução temporal (usando o tempo transladado $t = 2^n - 1$) da variância de um *ensemble* de $M = 10^4$ trajetórias que começam em $x_0 = 0$, para diferentes ordens de magnitude da intensidade do ruído *sigma*. Note-se que o tempo de *crossover* coincide com σ^{r-1} (com $r \simeq 0.633$), indicado por flechas (veja o texto).

na Fig. 2.6(a)). Já que os afastamentos entre bandas no espaço- $|x|$ são de comprimento variável, incrementando de tamanho para $|x| \rightarrow 1$, o movimento fica confinado entre poucas bandas por um certo tempo, mas para tempos maiores os iterados podem se espalhar para bandas mais distantes por causa do efeito acumulado do termo de ruído.

A análise do tempo de *crossover* t_c para o aumento do número de bandas visitadas pode ser quantificado. No limiar do caos $\mu = \mu_\infty$, para $\sigma \neq 0$, a posição do iterado de $x_{in} = 0$ ao tempo translado $t_0 = \tau_0 - 1$ é dado por (veja [62] para detalhes):

$$x_{t_0} = \exp_{2-q}(-\lambda_q t_0) [1 + \tilde{\xi}_{t_0} \sigma \exp_r(\lambda_r t_0)], \quad (2.69)$$

onde $q = 1 - \ln 2 / \ln \alpha = 0.2445\dots$, $\lambda_q = \ln \alpha / \ln 2 = 1.3236\dots$ é o coeficiente de Lyapunov generalizado, $r = 1 - \ln 2 / \ln \kappa \simeq 0.633$, $\lambda_r = \ln \kappa / \ln 2 \simeq 2.727$ ($\alpha = 2.50290\dots$ é uma das constantes universais de Feigenbaum e $\kappa \simeq 6.619$ é uma constante associada ao termo de ruído [8]). Consideramos agora uma trajetória diferente x'_{t_0} , também começando na origem em $t_0 = 0$: $x'_{in} = 0$. Como o termo de ruído atua independentemente em cada trajetória, depois de um tempo t_0 a separação entre as órbitas é dada por

$$x_{t_0} - x'_{t_0} = \exp_{2-q}(-\lambda_q t_0) \exp_r(\lambda_r t_0) \sigma (\tilde{\xi}_{t_0} - \tilde{\xi}'_{t_0}). \quad (2.70)$$

Ao tempo $t_0 = 2^n - 1$ a separação entre bandas onde o iterado é posicionado é da ordem $\exp_{2-q}(-\lambda_q t_0)$. Usando $\tilde{\xi}_{t_0} - \tilde{\xi}'_{t_0} \sim 1$ obtemos uma estimativa do tempo de *crossover* t_c em que os saltos entre bandas diferentes começa a aparecer. Esta estimativa é dada por

$$\exp_r(\lambda_r t_c) \sigma \sim 1 \Rightarrow t_c \sim \sigma^{r-1}. \quad (2.71)$$

Para exibir a estrutura de platôs múltiplos neste modelo dinâmico, consideramos em seguida um *ensemble* de $\mathcal{N} = 10^3$ cópias independentes do mapa (2.68) ao limiar do caos $\mu = \mu_\infty$. As posições iniciais são $x_{in} = 0 \forall \mathcal{N}$ e medimos a *variância* $\langle x_{t_0}^2 \rangle - \langle x_{t_0} \rangle^2$ (que tem um papel análogo ao da *temperatura* na descrição estatístico-mecânica de sistemas Hamiltonianos - veja os próximos capítulos) da distribuição de posições no tempo $t = 2^n - 1$. A Fig. 2.10(b) mostra uma corroboração numérica de recentes resultados analíticos [62], para valores diferentes da intensidade do ruído σ . Enquanto durante o primeiro platô a

variância é nula, já que a dinâmica das N trajetórias é confinada ao atrator, ao tempo do *crossover* $t_c \sim \sigma^{-1}$ o *ensemble* de órbitas começa a se espalhar e a variância cresce até que um segundo platô é alcançado, onde satura como consequência do confinamento induzido pelas regiões de instabilidade dos repulsores. Como pode ser visto claramente na Fig. 2.11, para tempos suficientemente grandes é possível perceber um novo incremento da variância já que os iterados conseguem alcançar outras bandas do atrator. Todo este processo termina quando todas as bandas ficam ocupadas e como consequência a variância é da ordem de 1. Note-se que enquanto os iterados ficam no primeiro platô, eles visitam um conjunto cuja dimensão fractal é fracionária, enquanto para o equilíbrio final, o *ensemble* vive, graças à ação do termo de ruído, num espaço de fases de dimensão um.

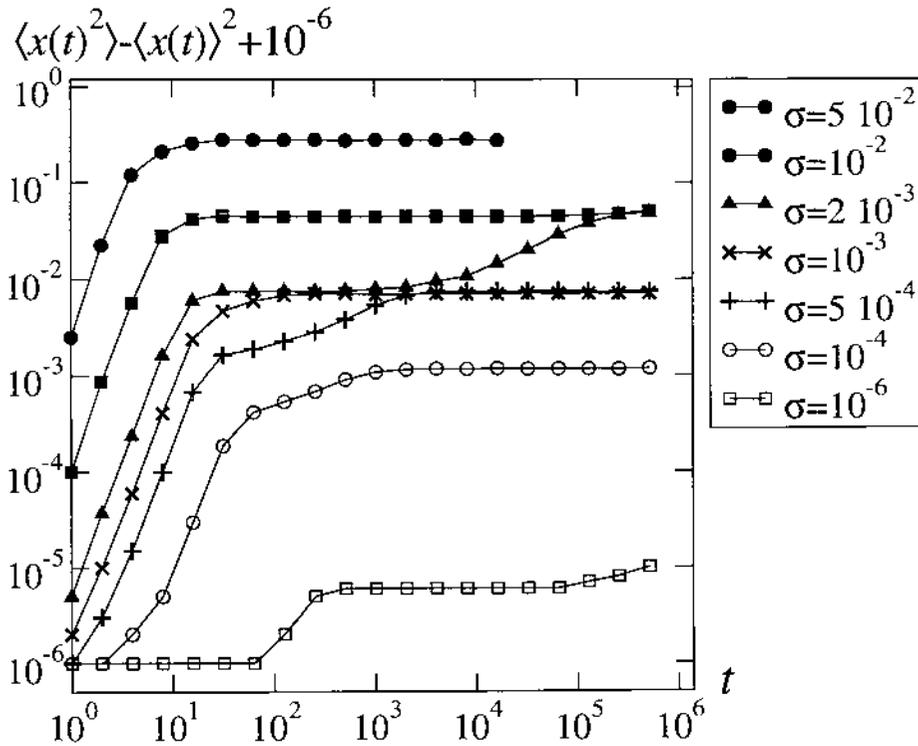


Figura 2.11: Estrutura de platôs para o mapa logístico com um ruído aditivo. Evolução temporal (usando $t_0 = 2^n - 1$) da variância de um *ensemble* de $\mathcal{N} = 10^4$ trajetórias começando todas em $x_{in} = 0$, para valores diferentes da intensidade do ruído σ . Para poder exibir dados com diferente ordem de magnitude, o eixo y foi representado numa escala logarítmica com uma translação de 10^6 .

Capítulo 3

Sistemas conservativos I: mapas simpléticos

Neste capítulo abordamos os tópicos principais da tese no contexto de mapas simpléticos, sistemas dinâmicos não-lineares de tempo discreto deduzidos de sistemas Hamiltonianos de tempo contínuo. Veremos que estes mapas fornecem novas classes de comportamentos dinâmicos anômalos onde a teoria não-extensiva se mostra uma interessante ferramenta para uma descrição estatística destes fenômenos. Antecipamos que, devido à maior complexidade destes sistemas, os resultados para a sensibilidade às condições iniciais e para o crescimento da entropia são menos definitivos que no caso dos mapas unimodais.

3.1 Mapas simpléticos e teoria KAM

Sistemas conservativos apresentam propriedades dinâmicas bem diferentes daquelas dos sistemas dissipativos. Uma destas diferenças é dada pelo fato que a transição da caoticidade à regularidade acontece no espaço de fases sem um *limiar do caos* bem identificado, mas de uma forma mais complexa onde, tipicamente, estruturas fractais separam camadas caóticas de regiões regulares. Nesta borda, para uma grande classe de sistemas Hamiltonianos, atua um mecanismo descrito pela teoria de Kolmogorov-Arnold-Moser (KAM), que resumimos

aqui brevemente.

Sistemas Hamiltonianos independentes do tempo são sistemas dinâmicos caracterizados por um número par de dimensões $d = 2n$ (n é o número de graus de liberdade) e para uma única função, a Hamiltoniana H , que determina um conjunto completo de equações diferenciais para as d variáveis. Consideramos um sistema Hamiltoniano contínuo com n graus de liberdade que pode ser escrito na forma [78, 79]:

$$H = H_0(I_1, \dots, I_n) + \epsilon V(I_1, \theta_1, \dots, I_n, \theta_n), \quad (3.1)$$

onde H_0 é integrável¹ (I_1, \dots, I_n são os seus integrais do movimento), $\epsilon \ll 1$, e V é uma perturbação não linear. Sob determinadas hipóteses (veja, por exemplo, [78, 79]), para $\epsilon = 0$ as trajetórias ficam confinadas por toros invariantes de dimensão n . Subconjuntos especiais destes toros são chamados *toros de ressonância*. Especificamente, se introduzimos as frequências não-degeneradas do movimento não-perturbado ω_j ,

$$\omega_j \equiv \frac{\partial H_0}{\partial I_j} \quad (j = 1, \dots, n), \quad (3.2)$$

temos que a condição

$$\sum_{j=1}^n m_j \omega_j = 0 \quad (3.3)$$

(onde m_j são número inteiros) define os toros de ressonância. Cada toro de ressonância comporta a formação de um ciclo de separatrizes. A ação do termo de perturbação, para valores suficientemente pequenos de $\epsilon \neq 0$, deforma toros normais em toros KAM, e, em relação aos toros de ressonância, destrói as separatrizes substituindo-as com *camadas estocásticas*. O espaço de fases é composto neste caso por uma complicada mistura de toros KAM invariantes e de regiões caóticas. Cada região caótica se encontra em contato com um toro KAM crítico cujo coeficiente máximo de Lyapunov se anula, e as órbitas

¹Um sistema Hamiltoniano contínuo com n graus de liberdade que não depende explicitamente do tempo é dito *integrável* se tem n integrais do movimento independentes (constantes do movimento globais). Neste caso, através de uma transformação canônica, o sistema pode ser reduzido em *forma normal*. Nas novas coordenadas, chamadas de *variáveis de ângulo-ação*, as equações de movimento coincidem com aquelas de n movimentos circulares desacoplados.

caóticas ficam repetidamente coladas a estes toros KAM, com uma distribuição a lei de potência dos tempos de contato (veja, por exemplo, [80] e referências ali sugeridas). Nestas condições, uma das características principais do caos Hamiltoniano é a *não-ergodicidade*, devida à existência de uma medida finita do volume das ilhas definidas pelos toros KAM. O conjunto das ilhas é um conjunto fractal chamado de ‘*ilhas-em-torno-de-ilhas*’ (veja, por exemplo [81]) e as camadas estocásticas, nas vizinhanças da borda das ilhas, têm um papel crucial na dinâmica do sistema.

Os toros de ressonância, no espaço gerado por $\omega_1, \dots, \omega_n$, ficam na intersecção entre o hiperplano definido pela condição de ressonância e a hipersuperfície de energia

$$E = H_0(\omega_1, \dots, \omega_n). \quad (3.4)$$

No caso $n > 2$ as camadas estocásticas se fundem numa única *rede estocástica* conexa que é densa no espaço de fases para todos $\epsilon \neq 0$ [79]. Neste caso se podem ter processos de *difusão de Arnold*. É importante frisar que para $n = 2$ os toros KAM constituem *barreiras completas* para processos difusivos no espaço de fases. De qualquer forma, dentro do mar estocástico, é possível também encontrar conjuntos de Cantor, chamados *cantoros*, que constituem *barreiras parciais* para a difusão (veja [82] para detalhes).

3.1.1 Mapas simpléticos: o mapa standard

Uma maneira conveniente para estudar sistemas Hamiltonianos é utilizando *mapas simpléticos*. Se estamos interessados em estudar as propriedades de um *sistema isolado* (digamos, numa perspectiva microcanônica), podemos aproveitar o fato que H é constante ao longo de cada trajetória e limitar a análise à hipersuperfície de energia constante no espaço de fases, limitando assim a ordem do sistema para $2n - 1$. Em física estatística estamos mais interessados no estudo das *trajetórias recorrentes*, ou seja, daquelas trajetórias que voltam um número indefinido de vezes nas vizinhanças de qualquer parte do espaço de fases que já visitaram uma vez. Neste caso obtemos uma importante simplificação do problema (especialmente para os experimentos numéricos) considerando uma *seção de Poincaré* do espaço de fases. Isto é obtido seccionando transversalmente a hipersuperfície de energia constante

e considerando as sucessivas intersecções de cada órbita com esta superfície transversal². Desta maneira, passamos de um sistema de tempo contínuo de $2n - 1$ equações diferenciais para um sistema de *tempo discreto* de $d_M = 2n - 2$ equações diferenciais, chamado *mapa Hamiltoniano*. O mapa $\mathbf{M}(\mathbf{x}) \equiv (M_1(\mathbf{x}), \dots, M_{d_M}(\mathbf{x}))$ assim obtido é *simplético* [9, 78]; isto significa que a matriz Jacobiana do mapa,

$$\mathbf{DM}(\mathbf{x}) \equiv \left(\frac{\partial M_i}{\partial x_j} \right)_{i,j=1,2,\dots,d_M}, \quad (3.5)$$

satisfaz a relação

$$\mathbf{DM}^\dagger \mathbf{J} \mathbf{DM} = \mathbf{J} \quad (3.6)$$

onde \mathbf{DM}^\dagger coincide com a matriz transposta (\mathbf{DM} é real), \mathbf{J} é definido por

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.7)$$

e \mathbf{I} é a matriz unitária $d_M/2 \times d_M/2$. Pode ser demonstrado [78] que a condição de simpléticidade implica a *conservação do volume* no espaço de fases:

$$\det \left(\frac{\partial M_i}{\partial x_j} \right) = 1. \quad (3.8)$$

Como antecipado no primeiro capítulo, a estrutura simplética implica também no acoplamento em pares do espectro de coeficientes de Lyapunov, com a propriedade que cada elemento do par é o oposto do outro. Vejamos porque em alguns detalhes [9, 78]. Se, dado o ponto \mathbf{x}_0 no espaço de fases consideramos um deslocamento infinitésimo ao longo do vetor tangente \mathbf{y}_0 , a evolução do vetor tangente

$$\mathbf{y}_{t+1} = \mathbf{DM}(\mathbf{x}_t) \cdot \mathbf{y}_t \quad (3.9)$$

determina então a evolução do deslocamento infinitesimal da órbita, em relação à órbita não-perturbada \mathbf{x}_t . Em particular, $\mathbf{y}_t/|\mathbf{y}_0|$ fornece a *direção* do deslocamento da órbita

²Note-se que em geral órbitas diferentes terão diferentes tempos de recorrência. Mesmo assim, como em estatística estamos tipicamente interessados em caracterizar comportamentos médios de tempo longo, a seção de Poincaré é uma descrição significativa destes tipo de propriedade do sistema.

em relação a \mathbf{x}_t , e $|\mathbf{y}_t|/|\mathbf{y}_0|$ descreve o *fator de crescimento*. Usando as propriedades elementares da derivada temos que

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_{t+1} &= \mathbf{DM}(\mathbf{x}_t) \cdot \mathbf{y}_t \\ &= \mathbf{DM}^t(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{y}_0 \\ &= \mathbf{DM}(\mathbf{x}_{t-1}) \cdot \mathbf{DM}(\mathbf{x}_{t-2}) \cdot \dots \cdot \mathbf{DM}(\mathbf{x}_0). \end{aligned} \quad (3.10)$$

O coeficiente de Lyapunov $\lambda(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$, para a condição inicial \mathbf{x}_0 e a orientação inicial do deslocamento $\mathbf{u}_0 \equiv \mathbf{y}_0/|\mathbf{y}_0|$, é dado por

$$\begin{aligned} \lambda(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) &\equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \left(\frac{|\mathbf{y}_t|}{|\mathbf{y}_0|} \right) \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln |\mathbf{DM}^t(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{u}_0|. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Agora, é fácil verificar que o produto de duas matrizes simpléticas \mathbf{A} e \mathbf{B} é também uma matriz simplética:

$$(\mathbf{AB})^\dagger \mathbf{J} \mathbf{AB} = \mathbf{B}^\dagger (\mathbf{A}^\dagger \mathbf{J} \mathbf{A}) \mathbf{B} = \mathbf{B}^\dagger \mathbf{J} \mathbf{B} = \mathbf{J}, \quad (3.12)$$

portanto temos que $\mathbf{DM}^t(\mathbf{x}_0)$ é simplética. Examinamos as implicações da propriedade de simpleticidade para os autovalores da matriz. Se \mathbf{A} é simplética, os seus autovalores γ são dados pelas raízes do polinômio característico

$$D(\gamma) \equiv \det(\mathbf{A} - \gamma \mathbf{I}). \quad (3.13)$$

Multiplicando a definição de matriz simplética por $\mathbf{J}^{-1}(\mathbf{A}^\dagger)^{-1}$ do lado esquerdo, temos

$$\mathbf{A} = \mathbf{J}^{-1}(\mathbf{A}^\dagger)^{-1} \mathbf{J}. \quad (3.14)$$

O polinômio característico se torna então

$$\begin{aligned} D(\gamma) &= \det[\mathbf{J}^{-1}(\mathbf{A}^\dagger)^{-1} \mathbf{J} - \gamma \mathbf{I}] \\ &= \det\{\mathbf{J}^{-1}[(\mathbf{A}^\dagger)^{-1} - \gamma \mathbf{I}] \mathbf{J}\} \\ &= \det[(\mathbf{A}^\dagger)^{-1} - \gamma \mathbf{I}] \\ &= \det(\mathbf{A}^{-1} - \gamma \mathbf{I}), \end{aligned} \quad (3.15)$$

ou, seja, os autovalores de \mathbf{A} e \mathbf{A}^{-1} coincidem. Já que os autovalores de \mathbf{A} e \mathbf{A}^{-1} também são os inversos um do outro, observamos que devem ocorrer em pares (γ, γ^{-1}) . Como os coeficientes de Lyapunov são obtidos dos logaritmos da magnitude dos autovalores ($\lambda = \ln |\gamma|$), concluímos que eles aparecem em pares $\pm\lambda$.

É interessante notar que um mapa simplético $2n$ -dimensional é também o resultado de uma seção de Poincaré no espaço de fases de um sistema *aberto* de n graus de liberdade com uma Hamiltoniana que depende do tempo *periodicamente* (veja, por exemplo, [9]).

Tipicamente, o mapa \mathbf{M} depende de um ou mais parâmetros que controlam o regime dinâmico do sistema. Dependendo destes parâmetros o sistema passa de um regime integrável para um regime caótico, atravessando a situação de transição descrita pela teoria KAM.

A dimensão mais baixa onde este mecanismo é reproduzido é dada por um mapa bidimensional. Um mapa que neste contexto tem um papel paradigmático análogo ao do mapa logístico para os sistemas dissipativos, é o *mapa standard* (ou mapa de Chirikov-Taylor) [83], que é definido pelas equações

$$\begin{aligned}\theta(t+1) &= p(t+1) + \theta(t) && \pmod{1}, \\ p(t+1) &= p(t) + (a/2\pi) \sin[2\pi\theta(t)] && \pmod{1},\end{aligned}\tag{3.16}$$

onde $t = 1, 2, \dots$, e $a \in \mathbb{R}$ é o parâmetro que controla a caoticidade. Como veremos em breve, θ pode ser considerada uma variável angular e p um momento angular (mesmo se definido sob um suporte compacto). Este mapa é integrável para $a = 0$, enquanto a caoticidade cresce rapidamente com $|a|$; para o valor crítico $a = a_c \equiv 0,971635406\dots$ tem-se a quebra do último toro KAM que se estende para todo o intervalo $0 \leq \theta < 1$. Na Fig. 3.1 mostramos o retrato de fases (*phase portrait*) do mapa (3.16) para diferentes valores de a e ilustramos a estrutura de ilhas-em-torno-de-ilhas.

O estudo de mapas simpléticos em geral é realizado para caracterizar as propriedades recorrentes de *classes de sistemas Hamiltoniano*, sem que seja preciso deduzir de forma explícita as equações do mapa de uma Hamiltoniana específica. Mesmo assim, a título de ilustração, pode ser interessante introduzir um modelo físico que gera as Eqs. (3.16).

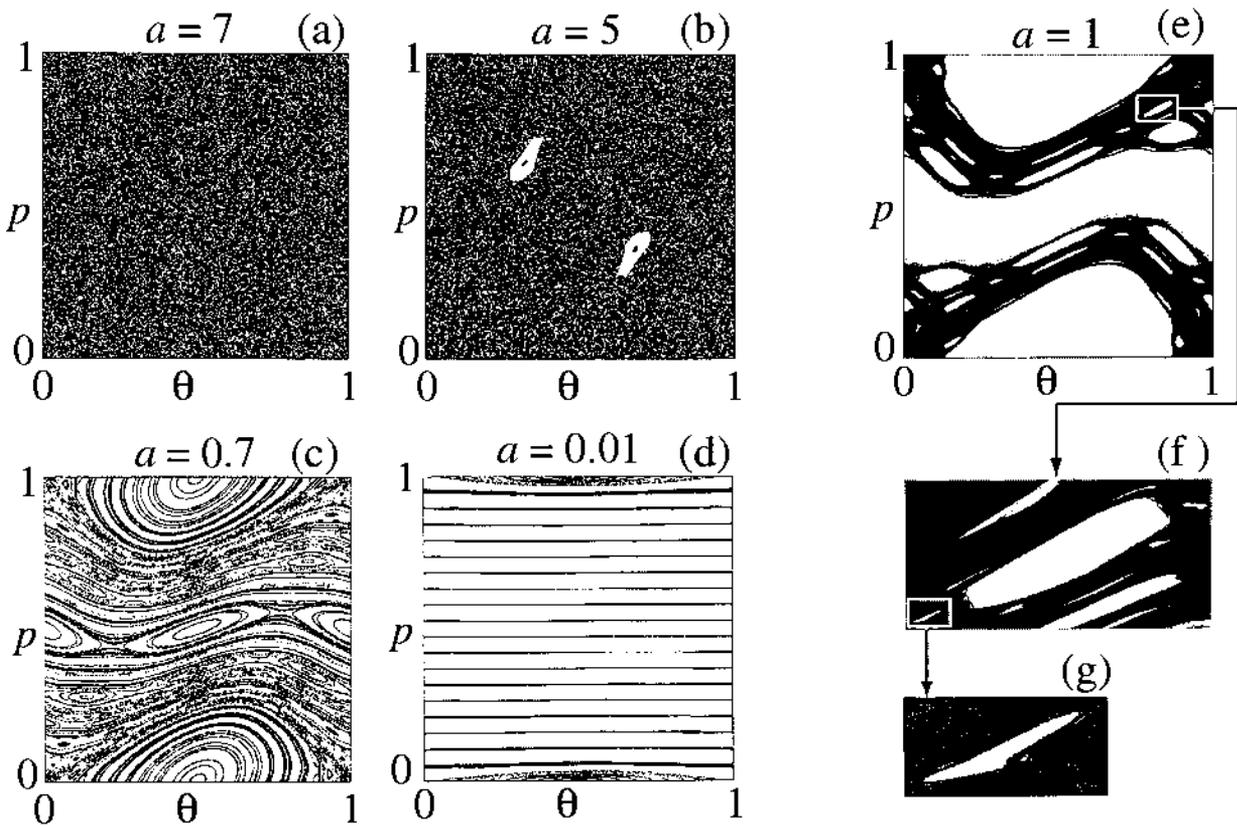


Figura 3.1: (a)–(d) Retrato de fases do mapa *standard* para valores típicos de a . $N = 20 \times 20$ órbitas (pontos pretos) foram iniciadas com uma distribuição uniforme no quadrado unitário e seguidas para $0 \leq t \leq 200$. (e)–(g) Ilhas-em-torno-de-ilhas. (e): $N = 100 \times 100$ dados iniciais foram iniciados dentro de um pequeno quadradinho de lado $\sim 10^{-2}$ e seguidas para $0 \leq t \leq 5000$. (f) é um ampliação da ilha dentro o retângulo em (e). (g) é um ampliação da ilha dentro o retângulo em (f).

Por isso se considere a equação de movimento de um *kicked rotor*, ou seja, de um pêndulo *plano* sob a ação de uma força que atua só por valores discretos $\bar{t} = t\tau$ (com $t = 0, 1, \dots$) do tempo contínuo $\bar{t} \in \mathbb{R}$:

$$\frac{d^2\bar{\theta}}{d\bar{t}^2} + \bar{a} \sin \bar{\theta} \sum_{t=0}^{\infty} \delta(\bar{t} - t\tau) = 0, \quad (3.17)$$

onde $\bar{\theta} \in [0, 2\pi)$ é o ângulo. Integrando Eq. (3.17) entre $t\tau < \bar{t} < (t+1)\tau$, temos $d^2\bar{\theta}/d\bar{t}^2 = 0$, ou seja, $d\bar{\theta}/d\bar{t}$ é uma constante que chamamos \bar{p}_{t+1} . Temos como consequência

$$\bar{\theta}(\bar{t}) = (\bar{t} - t\tau)\bar{p}_{t+1} + \bar{\theta}(t\tau). \quad (3.18)$$

Definindo $\bar{\theta}(t\tau) \equiv \bar{\theta}_t$, obtemos

$$\bar{\theta}_{t+1} = \tau\bar{p}_{t+1} + \bar{\theta}_t. \quad (3.19)$$

Para obter uma relação de recorrência para \bar{p}_t , integramos agora Eq. (3.17) entre $t\tau - \epsilon$ e $t\tau + \epsilon$, onde ϵ é uma quantidade infinitésima:

$$\int_{t\tau-\epsilon}^{t\tau+\epsilon} d\bar{t} \left[\frac{d^2\bar{\theta}}{d\bar{t}^2} + \bar{a} \sin \bar{\theta}_t \right] = 0 \quad (\epsilon \rightarrow 0). \quad (3.20)$$

Como

$$\left. \frac{d\bar{\theta}}{d\bar{t}} \right|_{t\tau+\epsilon} = p_{t+1} \quad \text{e} \quad \left. \frac{d\bar{\theta}}{d\bar{t}} \right|_{t\tau-\epsilon} = p_t, \quad (3.21)$$

temos que

$$\bar{p}_{t+1} - \bar{p}_t + \bar{a} \sin \bar{\theta}_t = 0. \quad (3.22)$$

Substituindo Eq. (3.22) na Eq. (3.19) obtemos finalmente

$$\bar{\theta}_{t+1} = \bar{\theta}_t + (\bar{p}_t - \bar{a} \sin \bar{\theta}_t)\tau. \quad (3.23)$$

Considerando $\tau = 1$ e usando as propriedades de simetria das Eqs. (3.22) e (3.23), podemos redefinir as coordenadas no quadrado unitário (mod 1) obtendo a Eq. do mapa *standard* (3.16).

Para discutir um sistema Hamiltoniano onde atua o mecanismo da difusão de Arnold [78, 79], neste capítulo consideramos também o mapa 4-dimensional obtido acoplando-se

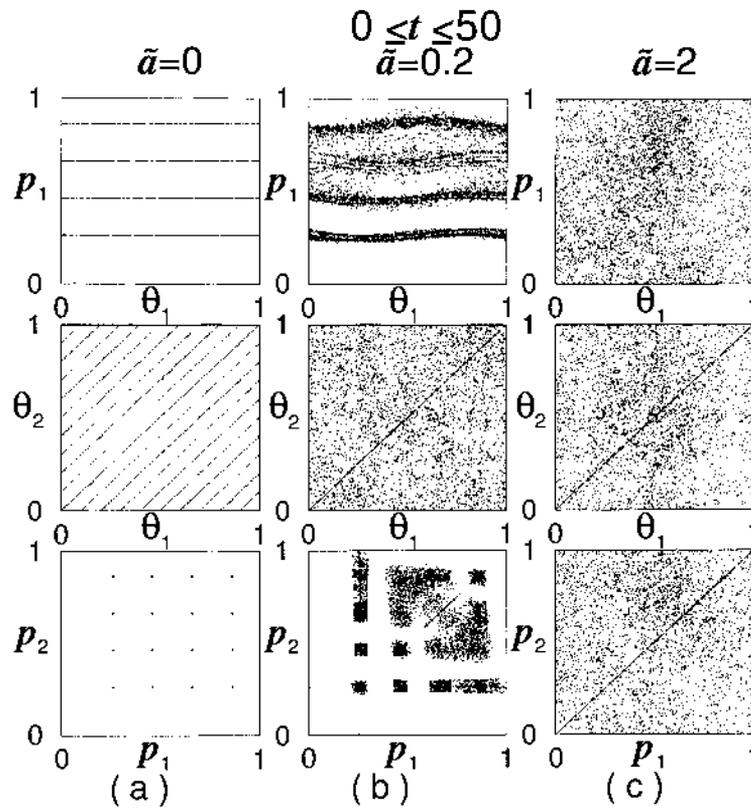


Figura 3.2: Retrato de fases de dois mapas *standard* acoplados simpléticamente através da Eq. (3.24), com $b = 0.5$ e $a_1 = a_2 \equiv \bar{a}$. Os pontos representam a *projeção* de trajetórias sobre planos diferentes. Seguimos a evolução dinâmica de um *ensemble* de $\mathcal{N} = 4^4$ pontos, com uma distribuição inicial uniforme, para $0 \leq t \leq 50$. (a) $\bar{a} = 0$: integrabilidade; (b) $\bar{a} = 0.2$: caos fraco; (c) $\bar{a} = 2$: caos forte.

dois mapas *standard* de forma que a simplécticidade seja mantida. Este resultado é por exemplo obtido através de um acoplamento linear:

$$\begin{aligned}
 \theta_1(t+1) &= p_1(t+1) + \theta_1(t) + b p_2(t+1) && \pmod{1}, \\
 \theta_2(t+1) &= p_2(t+1) + \theta_2(t) + b p_1(t+1) && \pmod{1}, \\
 p_1(t+1) &= p_1(t) + (a_1/2\pi) \sin[2\pi\theta_1(t)] && \pmod{1}, \\
 p_2(t+1) &= p_2(t) + (a_2/2\pi) \sin[2\pi\theta_2(t)] && \pmod{1},
 \end{aligned}
 \tag{3.24}$$

onde $a_1, a_2, b \in \mathbb{R}$. Com efeito, neste caso a matriz Jacobiana do mapa resulta ser

$$\begin{pmatrix}
 1 & 0 & a_1 \cos(2\pi\theta_1) & 0 \\
 0 & 1 & 0 & a_2 \cos(2\pi\theta_2) \\
 1 & b & 1 + a_1 \cos(2\pi\theta_1) & b a_2 \cos(2\pi\theta_2) \\
 b & 1 & b a_1 \cos(2\pi\theta_1) & 1 + a_2 \cos(2\pi\theta_2)
 \end{pmatrix}.
 \tag{3.25}$$

e à condição simplética Eq. (3.6) resulta satisfeita.

Note-se que se a constante de acoplamento b é zero os dois mapas *standard* são desacoplados. Salvo indicação contrária explícita, nas próximas seções consideramos a configuração $a_1 = a_2 \equiv \bar{a}$, de modo que o sistema é simétrico em relação à troca $1 \leftrightarrow 2$. Para um genérico valor de b , o sistema é integrável se $\bar{a} = 0$, enquanto a caoticidade cresce rapidamente com $|\bar{a}|$. Para valores intermédios de $|\bar{a}|$, as trajetórias no espaço de fases definem estruturas complexas de tipo elíptico. O espaço de fases se torna não uniforme e consiste de domínios de dinâmica caótica (mares estocásticos, camadas estocásticas, redes estocásticas, ...) e ilhas de dinâmica regular quase-periódicas [79]. A presença das estruturas elípticas é visível mesmo nas *projeções* das órbitas sobre os planos principais do espaço de fases. Isto é ilustrado na Fig. 3.2(a-c) onde mostramos a projeção sobre vários planos do retrato de fases do mapa Eq. (3.24), para os casos de caos forte ($\bar{a} = 2$), caos fraco ($\bar{a} = 0.2$), e integrabilidade ($\bar{a} = 0$). Para caracterizar ulteriormente as situações de caos forte e fraco, a Fig. 3.3 mostra, para diversos tempos *fixos*, a projeção da evolução de um *ensemble* inicialmente fora do equilíbrio. Nestas figuras fixamos $b = 0.5$.

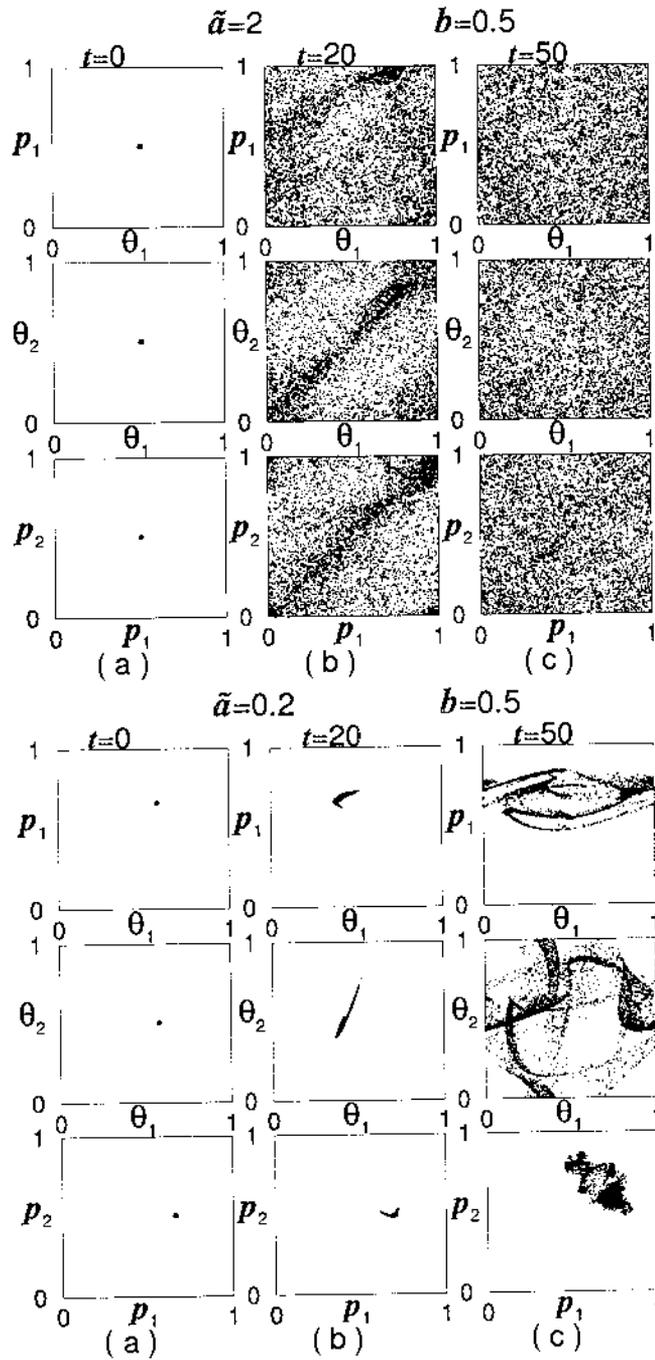


Figura 3.3: Evolução de um *ensemble* de $N = 10^3$ cópias do mapa (3.24) inicialmente fora do equilíbrio para tempos fixos nos caso de caos forte ($\tilde{a} = 2$, $b = 0.5$) e fraco ($\tilde{a} = 0.2$, $b = 0.5$). (a) $t = 0$; (b) $t = 20$; (c) $t = 50$.

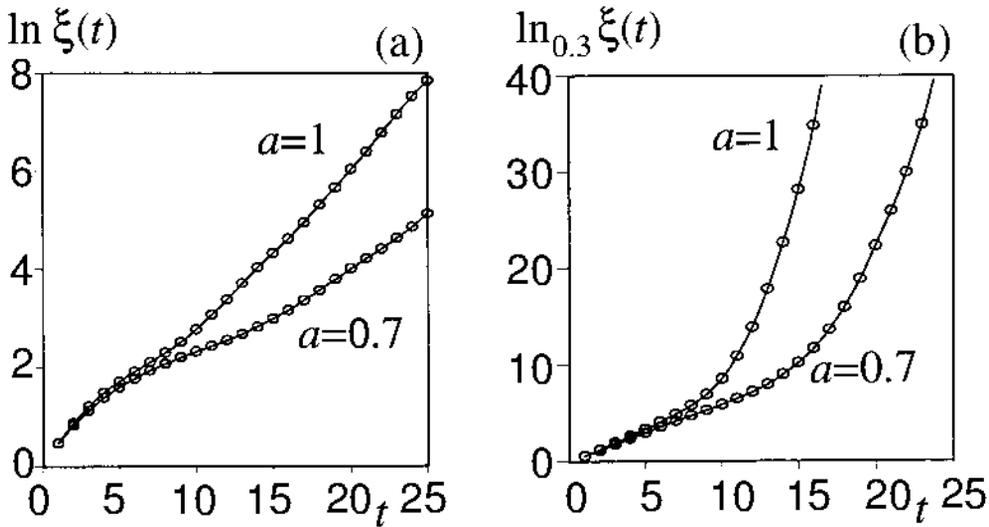


Figura 3.4: Sensibilidade média às condições iniciais para o mapa *standard* para pequenos valores de a . Foram considerados dados iniciais com uma separação da ordem $|\delta \mathbf{x}_0| \sim 10^{-9}$ e os resultados representam médias sobre 5000 realizações amostrando todo o espaço de fases. Em (a) $\ln(\xi(t))$ exibe um incremento linear só depois de um certo tempo. Correspondentemente, em (b) $\ln_{0.3}(\xi(t))$ mostra um incremento linear para os tempos iniciais.

3.2 Sensibilidade às condições iniciais e produção de entropia

Nesta seção analisamos a sensibilidade às condições iniciais e a produção de entropia para o caso 2-dimensional constituído por um mapa *standard* Eq. (3.16) [52, 56, 57], e o caso 4-dimensional de dois mapas *standard* acoplados Eq. (3.24) [53].

3.2.1 Caso 2-dimensional: Sensibilidade às condições iniciais

No caso do mapa *standard*, a sensibilidade às condições iniciais depende de modo dramático da posição no espaço de fases. As regiões caóticas produzem uma separação exponencial, enquanto as regiões regulares mostram um afastamento linear, de condições iniciais inicialmente próximas. Além disto, as estruturas fractais tipo a de ilhas-em-torno-de-ilhas.

prendem as trajetórias nos seus arredores por tempos regulados por leis de potência [80]. Se porém estamos interessados em caracterizar um comportamento *médio global*, podemos realizar um experimento numérico amostrando uniformemente o espaço de fases com duplas de dados iniciais com um afastamento pequeno ao longo de direções arbitrárias, e calculando uma sensibilidade média às condições iniciais:

$$\xi(t) \equiv \langle \xi(\mathbf{x}(0), \mathbf{y}(0), t) \rangle_{\mathbf{x}(0), \mathbf{y}(0)}(t), \quad (3.26)$$

onde $\xi(\mathbf{x}(0), \mathbf{y}(0), t)$ é definido em Eq. (1.84). Quando este experimento é realizado para valores relativamente pequenos de $|a|$, obtemos o resultado representado em Fig. 3.4 [52]. Existe um *crossover* temporal entre dois regimes [52, 61]. A Fig. 3.4(a) mostra de fato um incremento linear de $\ln(\xi(t))$ somente depois de um certo número de iterações. Correspondentemente, na Fig. 3.4(b) se observa um crescimento linear de $\ln_q(\xi(t))$ (numericamente foi encontrado $q \simeq 0.3$) precisamente por aquele intervalo temporal em que o $\ln(\xi(t))$ é concavo. Além disso, o tempo que define o *crossover* entre estes dois regimes cresce quando $|a|$ decresce. Este comportamento pode ser interpretado nestes termos. Durante os tempos iniciais, a sensibilidade média às condições iniciais é controlada pela presença de estruturas elípticas e exibe um crescimento a lei de potência. Em seguida, o crescimento exponencial típico das regiões caóticas suprime o comportamento a lei de potência na média global.

Pode-se modelar este comportamento, do ponto de vista qualitativo, de uma forma bastante interessante [54]. Primeiro, observamos que a sensibilidade às condições iniciais exponencial e a lei de potência podem ser consideradas como soluções das equações diferenciais

$$\dot{\xi} = \lambda \xi \quad \text{e} \quad \dot{\xi} = \lambda_q \xi^q \quad (3.27)$$

respectivamente. Somando estas duas equações diferenciais e redefinindo oportunamente λ_q obtemos

$$\dot{\xi} = \lambda \xi + (\lambda_q - \lambda) \xi^q \quad (q < 1, \lambda, \lambda_q > 0), \quad (3.28)$$

cuja solução [84]

$$\xi(t) = \left[1 - \frac{\lambda_q}{\lambda} + \frac{\lambda_q}{\lambda} e^{(1-q)\lambda t} \right]^{\frac{1}{1-q}}, \quad (3.29)$$

apresenta, para o caso $0 < \lambda \ll \lambda_q$, três comportamentos assintóticos:

(i) linear.

$$\xi \sim 1 + \lambda_q t, \quad (3.30)$$

para $0 \leq t \ll t_{cross1} \equiv \frac{1}{(1-q)\lambda_q}$;

(ii) lei de potência,

$$\xi \sim [(1-q)\lambda_q]^{\frac{1}{1-q}} t^{\frac{1}{1-q}}, \quad (3.31)$$

para $t_{cross1} \ll t \ll t_{cross2} \equiv \frac{1}{(1-q)\lambda}$;

(iii) exponencial,

$$\xi \sim \left(\frac{\lambda_q}{\lambda}\right)^{\frac{1}{1-q}} e^{\lambda t}, \quad (3.32)$$

para $t \gg t_{cross2}$.

3.2.2 Caso 2-dimensional: Produção de entropia

A análise da produção de entropia no mapa *standard* fornece resultados consistentes com aqueles da sensibilidade às condições iniciais. Em analogia com a seção 2.3, introduzimos um *coarse graining* no espaço de fases dividindo-o em W células quadradas do mesmo tamanho, e consideramos um *ensemble* de \mathcal{N} cópias do mapa *standard* (\mathcal{N} pontos no espaço de fases) numa configuração inicial fora do equilíbrio obtida colocando todos os \mathcal{N} pontos dentro de uma mesma célula. Com esta configuração a entropia inicial é nula, já que todas as probabilidades menos uma são zero. Medimos a produção de entropia através da distribuição de probabilidade definida pelo número de ocupação n_i de cada célula:

$$S_q(t) \equiv \langle S_q(\{p_i(t)\}, \{p_i(0)\}) \rangle_{\{p_i(0)\}}(t), \quad p_i \equiv \frac{n_i}{\mathcal{N}}, \quad i = 1, 2, \dots, W, \quad (3.33)$$

onde a média $\langle \rangle_{\{p_i(0)\}}$ é realizada sobre diferentes condições iniciais $\{p_i(0)\}$. Notamos que para obter uma definição consistente da distribuição de probabilidade, o número máximo W_{max} de células ocupadas ao longo do cálculo deve ser $W_{max} \ll \mathcal{N}$.

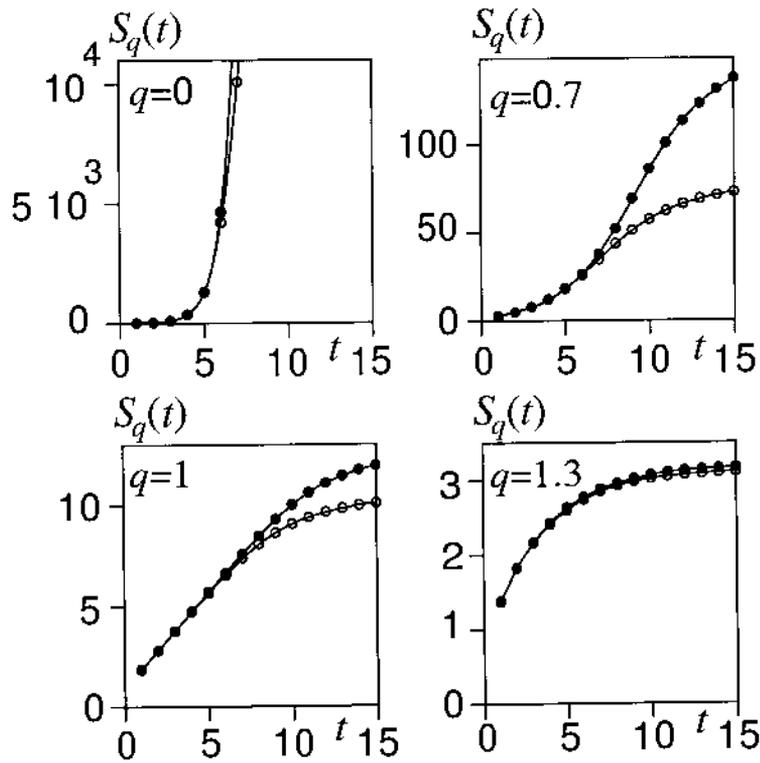


Figura 3.5: Produção de entropia no mapa *standard* no regime de caos forte. $S_q(t)$ para $a = 5$ e diferentes valores de q (foi feita uma média sobre 1000 condições iniciais diferentes). Círculos cheios (vazios) correspondem a $N/10 = W = 708 \times 708$ ($N/10 = W = 224 \times 224$). As linhas servem de guias para o olho. A inclinação de $S_1(t)$ entre $t_1 = 2$ e $t_2 = 6$ é $K_1(5) \simeq 0.97$.

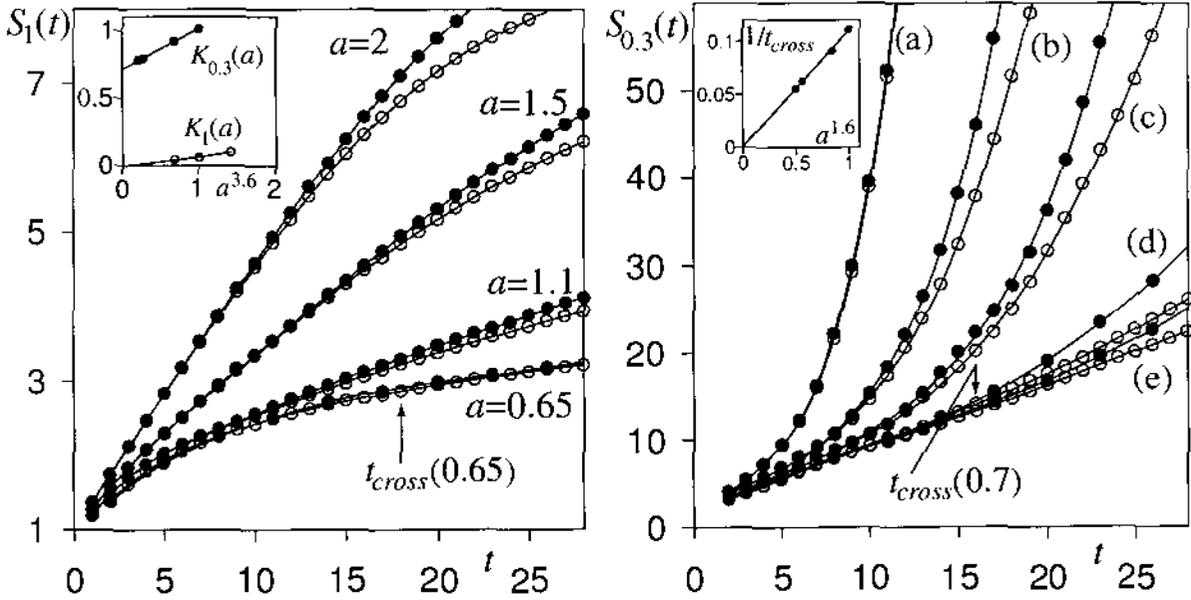


Figura 3.6: Produção de entropia no mapa *standard* no regime de caos fraco. Os dados representam médias sobre 5000 para 7000 realizações. (a) $S_1(t)$ para diferentes valores de $a \leq 2$. Círculos cheios correspondem a $\mathcal{N} = W = 1000 \times 1000$ para $a = 2, 1.5, 1.1$ ($\mathcal{N} = W = 5000 \times 5000$ para $a = 0.65$); círculos vazios correspondem a $\mathcal{N} = W = 448 \times 448$ para $a = 2, 1.5, 1.1$ ($\mathcal{N} = W = 2236 \times 2236$ para $a = 0.65$). Na figura inserida: inclinações de $S_1(t)$ ($K_1(a)$) e $S_{0.3}(t)$ ($K_{0.3} \simeq 0.71 + 0.30 a^{3.6}$) nos respectivos regimes lineares. (b) $S_{0.3}(t)$ para: $a = 1.5$ (i); $a = 1.1$ (ii); $a = 0.9$ (iii); $a = 0.7$ (iv); $a = 0.65$ (v) Círculos cheios correspondem a $\mathcal{N} = W = 1000 \times 1000$ for (i), (ii), (iii), $\mathcal{N} = W = 5000 \times 5000$ para (iv), (v); círculos vazios correspondem a $\mathcal{N} = W = 448 \times 448$ for (i), (ii), (iii), $\mathcal{N} = W = 2236 \times 2236$ for (iv), (v). Na figura inserida: tempo de *crossover* $t_{cross}(a)$ definido como a intersecção entre o regime linear e uma extrapolação padrão da parte curvilínea dos dados $S_{0.3}(t)$. Note-se que $t_{cross}(a)$ diverge para $a \rightarrow 0$. As linhas servem de guias para o olho.

Quando este experimento é realizado para valores suficientemente grandes de $|a|$, se obtém um resultado análogo ao caso esquemático da Fig. 1.4, como mostra a Fig. 3.5. Somente para $q = 1$ se obtém uma produção linear de entropia antes de uma saturação devida ao valor finito de W (para ocupação uniforme do espaço de fases, o valor máximo da entropia é $\ln_q W$). Porém, se realizamos o mesmo experimento para valores menores de $|a|$ [56, 57], aparece uma situação análoga a da Fig. 3.4 pela sensibilidade às condições iniciais. De fato, como se pode ver na Fig. 3.6, para valores pequenos de a e antes que as curvas comecem a saturar por causa do valor finito de W , a produção de entropia de S_1 torna-se linear somente depois de um regime em que $S_{0.3}$ é linear. Note-se também que o tempo de crossover entre os dois regimes diverge quando a tende a 0.

3.2.3 Caso 4-dimensional: Sensibilidade às condições iniciais

Como observamos na seção introdutória deste capítulo e como ficará evidente na análise dos platôs quase-estacionários da próxima seção, o fato de passar a considerar mapas simpléticos em 4 dimensões constitui uma mudança qualitativa básica na dinâmica do sistema. Para aprofundar o fenômeno da emergência de uma sensibilidade média às condições iniciais a lei de potência e do relativo crescimento linear da entropia S_q com $q < 1$, consideramos nesta e nas seguintes seções o caso de dois mapas *standard* acoplados da Eq. (3.24) [53]. Veremos que o regime anômalo detectado nas seções anteriores aparece também neste caso. Porém, durante este regime teremos que discutir a relação entre o parâmetro $q_s < 1$ que descreve a sensibilidade às condições iniciais e o parâmetro $q_e < 1$ que descreve o crescimento linear da entropia. Diferentemente do caso de caos usual, de fato estes dois parâmetros em geral não coincidem. Estudaremos a origem deste fato.

Antes de analisar em detalhe o caso de caos fraco, aqui também vejamos primeiro a situação de caos forte. Para extrair o valor médio do máximo expoente de Lyapunov e a produção média de entropia, nesta seção analisamos o valor médio $\langle \ln_q \xi \rangle(t)$ (em lugar de $\ln_q(\xi)(t)$), junto com cálculo da produção média de entropia $S_q(t)$ (3.33), sempre usando condições iniciais aleatoriamente distribuídas em todo o espaço de fases. Fig. 3.7, para

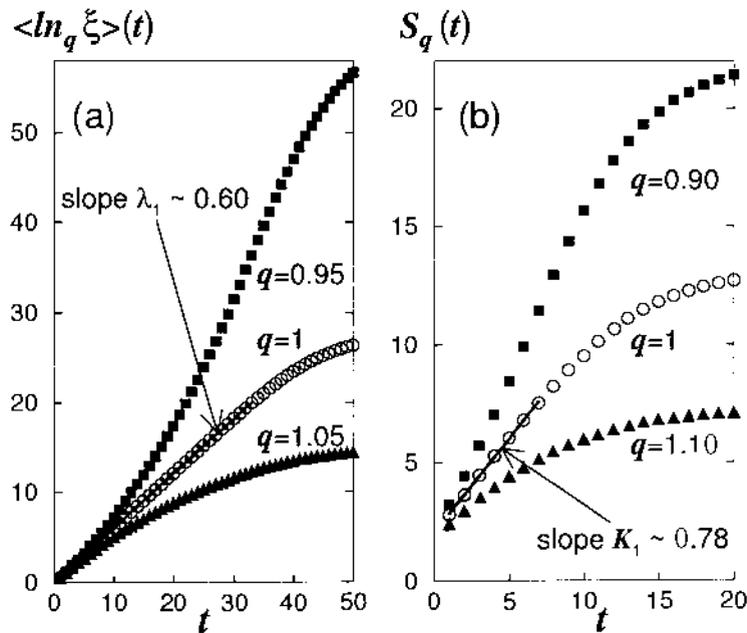


Figura 3.7: Valor médio do logaritmo da sensibilidade às condições iniciais (a) e produção média de entropia (b) para dois mapas *standard* acoplados em regime de caos forte $a_1 = 3$, $a_2 = 1$ e $b = 0.5$. A sensibilidade foi calculada analisando o crescimento da separação de 10^5 duplas de dados iniciais distribuídos aleatoriamente no espaço de fases, com uma separação da ordem de $|\delta \mathbf{x}_0| \simeq 10^{-12}$. A entropia foi calculada dividindo o espaço de fases em $W = 30^4$ hipercélulas e analisando o espalhamento de um *ensemble* de $N = 6 \times 10^6$ inicialmente distribuídos aleatoriamente dentro uma única hipercélula. O cálculo foi repetido 2000 vezes, escolhendo aleatoriamente as hipercélulas iniciais.

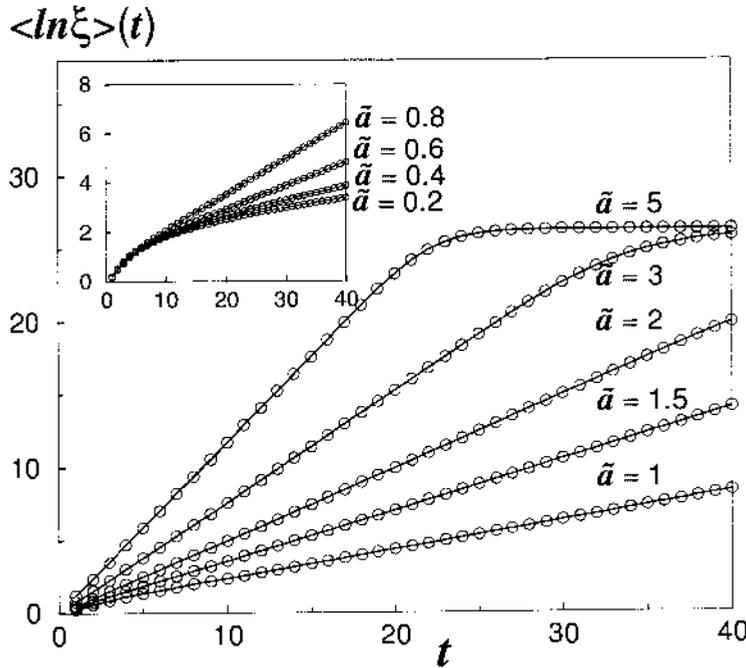


Figura 3.8: Valor médio do logaritmo da sensibilidade às condições iniciais para dois mapas *standard* acoplados com $b = 0.5$ e diferentes \tilde{a} . Foram analisadas 10^5 duplas de dados iniciais distribuídos aleatoriamente no espaço de fases, com uma separação da ordem de $|\delta \mathbf{x}_0| \simeq 10^{-12}$.

$q = 1$, reproduz os resultados em [55] com $a_1 = 3$, $a_2 = 1$ e $b = 0.5$ (caos forte). Somente para $q = 1$ ambas a média do logaritmo da sensibilidade às condições iniciais e a entropia média exibem um regime com um crescimento linear, antes do efeito de saturação devido a W finito. Se $q < 1$ ($q > 1$), a curva é convexa (côncava) para ambas as quantidades. Note-se que a inclinação do crescimento linear de $\langle \ln_1 \xi \rangle(t)$ é menor da inclinação do regime linear de $S_1(t)$, já que, dado que o espaço é 4-dimensional, existem dois coeficientes de Lyapunov positivos para ser considerados na igualdade de Pesin Eq. (1.87).

Consideramos então dois mapas *standard* acoplados através da Eq. (3.24) em uma configuração que exibe caos fraco. A Fig. 3.8 mostra que, fixando $b = 0.5$ e diminuindo $a_1 = a_2 \equiv \tilde{a}$, o valor médio do coeficiente máximo de Lyapunov tende a zero em consequência do fato que a dinâmica é cada vez mais vinculada pela presença de estruturas elípticas

no espaço de fases. Em particular, para $\tilde{a} \lesssim 0.8$ emerge um regime inicial para o qual $\langle \ln \xi \rangle(t)$ não é linear (veja a figura inserida em Fig. 3.8). De novo, a sensibilidade às condições iniciais em correspondência deste regime é uma lei de potência caracterizada por um coeficiente generalizado de Lyapunov $\lambda_{q_s} > 0$, com $q_s < 1$. Com efeito, a Fig. 3.9 exhibe que para específicos valores $q_s(\tilde{a}) < 1$ (veja também a Fig. 3.11), $(\ln_{q_s} \xi)(t)$ cresce linearmente durante o regime de caos fraco e começa a ser convexo quando a sensibilidade se torna exponencial, depois de um *crossover*. Para \tilde{a} tendendo a zero, o tempo de *crossover* entre este regime inicial e o regime de caos forte, caracterizado por um incremento linear de $\langle \ln \xi \rangle(t)$, cresce, de modo que a fase de caos fraco se torna cada vez mais importante e, no limite $\tilde{a} \rightarrow 0$, dura para sempre (veja figura inserida em Fig. 3.9). É bom ressaltar que agora temos um parâmetro q_s dependente de \tilde{a} . Para o caso integrável, como esperado, $q_s(0) = 0$.

3.2.4 Caso 4-dimensional: Produção de entropia

Também neste caso o regime de caos fraco pode ser detectado através de uma análise da produção de entropia, realizada de modo análogo ao caso 2-dimensional. Em Fig. 3.10 mostramos por exemplo o caso $b = 0.5$ e $\tilde{a} = 0.2$. Neste regime de caos fraco o resultado é similar à Fig. 3.7(b), só que agora o valor que define um crescimento linear da entropia é $q_e = 0.6$ em lugar de $q_e = 1$. De novo, encontramos que q_e depende de \tilde{a} .

A Fig. 3.11 sintetiza o comportamento de q_s e q_e em função de \tilde{a} , para dois valores da constante de acoplamento: $b = 0.5$ e $b = 0.2$. Contrariamente ao que acontece no regime de caos forte, no regime de caos fraco q_s e q_e não são iguais. Na próxima seção discutimos a origem desta diferença.

Um outro resultado numérico, é que, enquanto o coeficiente generalizado de Lyapunov aparece ser praticamente independente de \tilde{a} ($\lambda_{q_s} = 0.57$ e $\lambda_{q_s} = 0.50$ para $b = 0.20$ e $b = 0.50$ respectivamente), a taxa de entropia de Kolmogorov-Sinai generalizada K_{q_e} , exhibe uma leve dependência (decrecente) ao crescer de \tilde{a} . Por isto não temos ainda uma explicação clara.

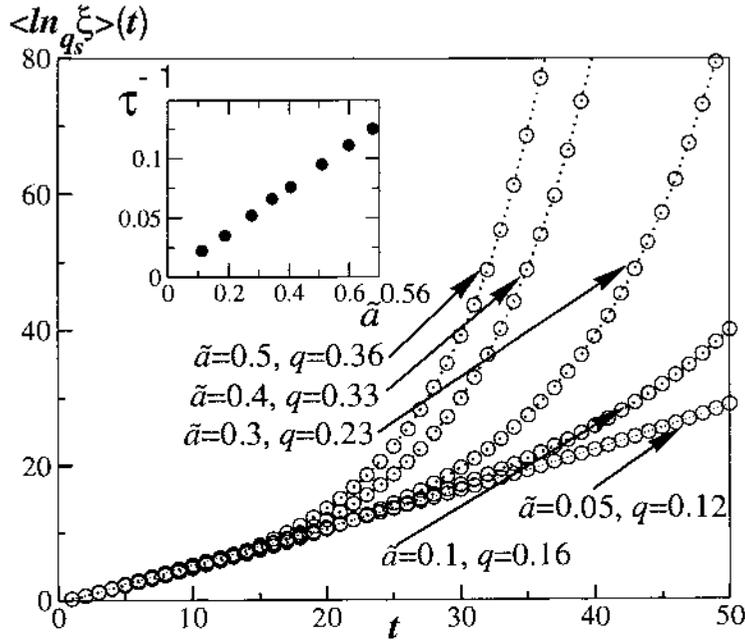


Figura 3.9: Valor médio do q_s -logaritmo da sensibilidade às condições iniciais para dois mapas *standard* acoplados com $b = 0.5$ e diferentes \tilde{a} . Foram analisadas 10^8 duplas de dados iniciais distribuídos aleatoriamente no espaço de fases, com uma separação da ordem de $|\delta \mathbf{x}_0| \simeq 10^{-12}$. q_s varia com \tilde{a} (veja também a Fig. 3.11) e foi determinado pela condição da derivada da curva ser constante. Na figura inserida mostramos o inverso do tempo de *crossover* em função de $\tilde{a}^{0.56}$.

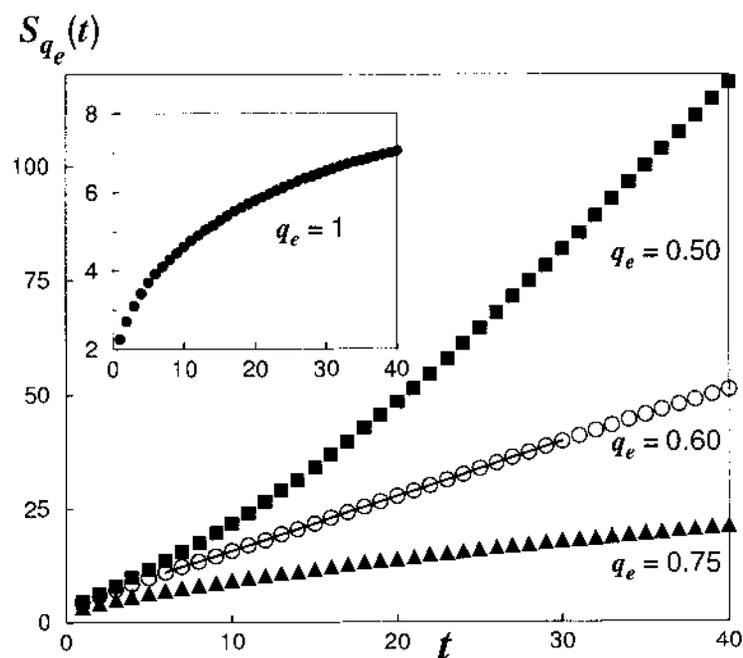


Figura 3.10: Produção média de entropia para dois mapas *standard* acoplados em regime de caos fraco $b = 0.5$ e $\tilde{a} = 0.2$. O espaço de fases foi dividido em $W = 30^4$ hipercélulas e foi analisado o espalhamento de um *ensemble* de $\mathcal{N} = 6 \times 10^6$ dados iniciais. O cálculo foi repetido 3000 vezes, escolhendo aleatoriamente as hipercélulas iniciais. q_e varia com \tilde{a} (veja também a Fig. 3.11) e foi determinado pela condição da derivada da curva ser constante.

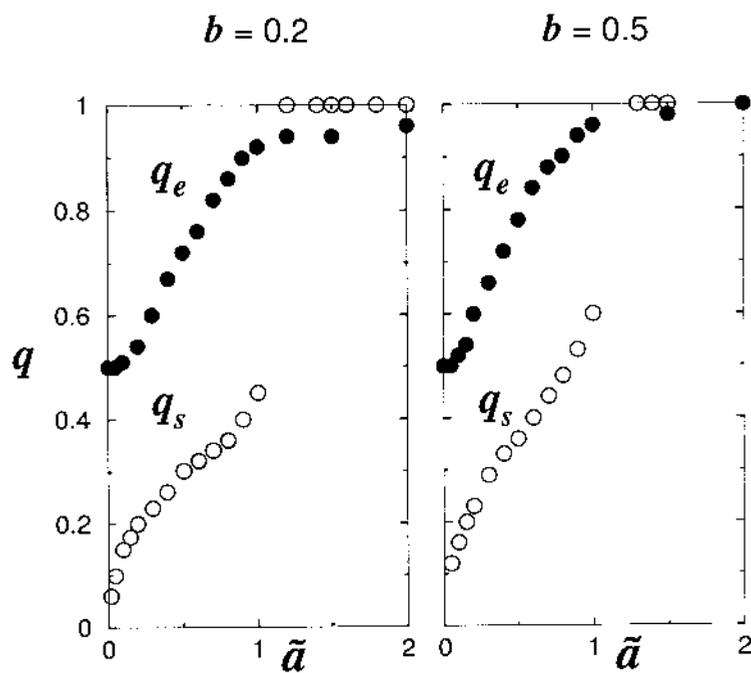


Figura 3.11: Comportamento de q_s e q_e em função de \tilde{a} , para $b = 0.2$ e $b = 0.5$. Os dois parâmetros coincidem somente no caso de caos forte, quando $q_s = q_e = 1$.

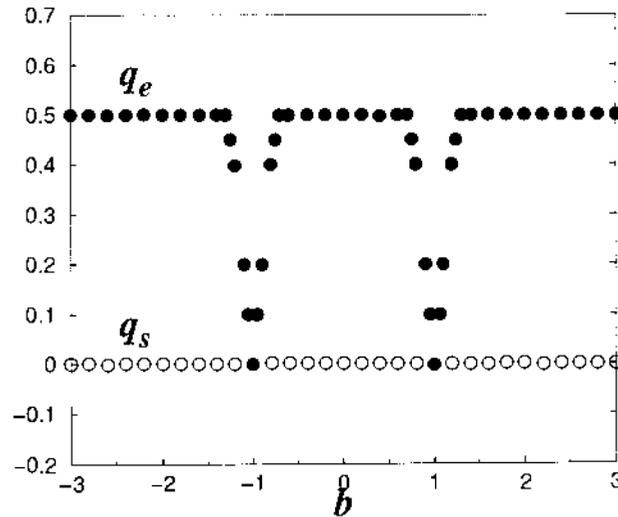


Figura 3.12: Comportamento de q_s e q_e em função de b , para o regime integrável $\tilde{a} = 0$. Os dois parâmetros coincidem somente no caso degenerado (veja o texto) $b = \pm 1$, quando $q_s = q_e = 0$.

3.2.5 Discussão

Para entender a origem da discrepância, no regime de caos fraco, entre q_s e q_e consideramos alguns aspectos geométricos. Em primeiro lugar lembramos a propriedade Eq. (1.13) da função q -logaritmo:

$$\ln_q W^\alpha = \alpha \ln_{q'} W, \quad (3.34)$$

onde $\alpha \neq 0$ e q, q' são relacionado através da equação

$$1 - q = \frac{1 - q'}{\alpha}. \quad (3.35)$$

Em segundo lugar fixamos por simplicidade a atenção no caso de um espaço de fases 2-dimensional, com uma evolução dinâmica simétrica em relação ao intercâmbio das duas coordenadas. Indicamos com $W^{(2)} = W^{(1)} \otimes W^{(1)}$ o número total de células bidimensionais no espaço de fases, obtidas através de uma partição de $W^{(1)}$ intervalos em cada coordenada. Suponhamos de ter um *ensemble* inicial fora do equilíbrio contido numa única célula bidimensional, e que a evolução dinâmica de cada trajetória implique num espalhamento do

ensemble no espaço de fases. Sejam $W^{(1)}(t)$ e $W^{(2)}(t)$ respectivamente o número de intervalos unidimensionais em uma das duas coordenadas e de células bidimensionais, ocupados pelo *ensemble* ao tempo t . A relação entre $W^{(1)}(t)$ e $W^{(2)}(t)$ depende das características da evolução dinâmica. Dois casos limites são

$$W^{(2)}(t) \propto W^{(1)}(t) \quad \text{e} \quad W^{(2)}(t) \propto [W^{(1)}(t)]^2. \quad (3.36)$$

O primeiro é realizado por exemplo quando existe uma direção predominante ao longo da qual o *ensemble* se estica, produzindo assim estruturas filamentosas no espaço de fases 2-dimensional e um crescimento essencialmente unidimensional. O segundo acontece por exemplo quando a evolução dinâmica nas duas coordenadas é desacoplada, de modo que $W^{(2)}(t)$ é simplesmente o produto Cartesiano $W^{(1)}(t) \otimes W^{(1)}(t)$. Agora, supondo $\ln_{q_s} W^{(1)}(t) \propto t$ para um valor específico do parâmetro q_s (utilizamos a notação q_s porque ξ representa o crescimento de um arco unidimensional), usando Eqs. (3.34) e (3.35) temos que $\ln_{q_e} W^{(2)}(t) \propto t$ para os valores

$$q_e = q_s \quad \text{e} \quad q_e = 1 - \frac{1 - q_s}{2}, \quad (3.37)$$

respectivamente para os dois casos limites anteriores. Note-se que para ambos os casos $q_s = 1 \Rightarrow q_e = 1$. Obviamente, este raciocínio pode ser generalizado para dimensões arbitrárias do espaço de fases.

Esta análise geométrica se aplica ao problema da produção de entropia, em sentido estrito, somente se a evolução do *ensemble* acontece através de distribuições uniformes no espaço de fases (eqüiprobabilidade), de modo que o valor da entropia generalizada é dado por $\ln_q W$. Mesmo assim, veremos agora que é útil para entender o comportamento dinâmico do modelo que estamos estudando. Começamos considerando o efeito do termo de acoplamento b no caso degenerado $\tilde{a} = 0$, que corresponde à integrabilidade. A Fig. 3.12 representa o comportamento de $q_s(b)$ e $q_e(b)$ para este caso. Como era esperado, $q_s(b)$ é sempre nulo, implicando num crescimento linear da sensibilidade às condições iniciais. De outro lado, se pode entender o comportamento de $q_e(b)$ analisando em mais detalhe a dinâmica. Temos que p_1 e p_2 são simplesmente conservados ao longo de qualquer trajetória

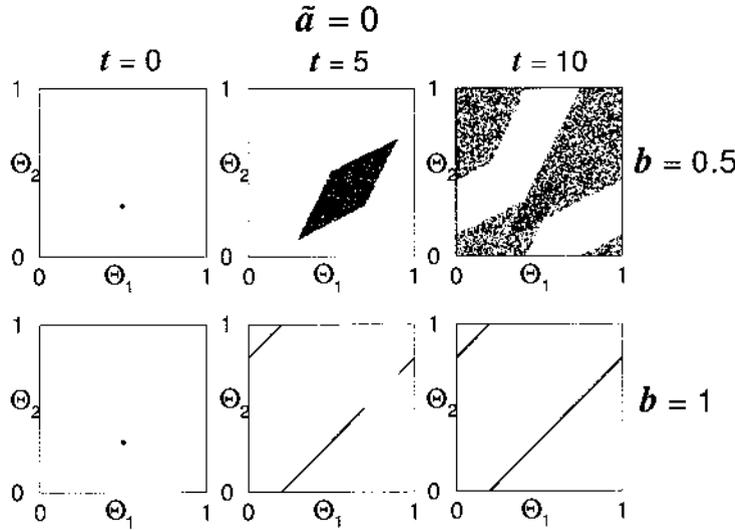


Figura 3.13: Evolução de um *ensemble* de $\mathcal{N} = 10^3$ cópias do mapa (3.24) inicialmente fora do equilíbrio para tempos fixos no caso integrável $\tilde{a} = 0$, $b = 0.5$ (primeira linha) e $b = 0.2$ (segunda linha). Mostramos a projeção do *ensemble* sobre o plano θ_1, θ_2 .

e que toda a evolução dinâmica interessante acontece no plano (θ_1, θ_2) através das leis de iteração

$$\begin{aligned}\theta_1(t+1) &= p_1(0) + \theta_1(t) + b p_2(0), \\ \theta_2(t+1) &= p_2(0) + \theta_2(t) + b p_1(0).\end{aligned}\tag{3.38}$$

É evidente que as duas coordenadas são desacopladas e para $b \neq \pm 1$ o crescimento do *ensemble* é bidimensional, como confirmado pela primeira linha da Fig. 3.13. Nestas condições temos $W^{(4)}(t) \propto W^{(2)}(t) \propto [W^{(1)}(t)]^2$, assim que, aplicando a análise anterior, obtemos $q_e = 0.5$. Para $b = \pm 1$ os mapas degeneram ulteriormente, já que agora temos mais uma quantidade conservada, ou seja,

$$\theta_1(t+1) \mp \theta_2(t+1) = \theta_1(t) \mp \theta_2(t).\tag{3.39}$$

Isto implica em $W^{(4)}(t) \propto W^{(2)}(t) \propto W^{(1)}(t)$, e obtemos $q_e = q_s = 0$. Em torno de $b = \pm 1$ acontece então uma transição de $q_e = 0.5$ para $q_e = 0$, como mostrado na Fig. 3.12.

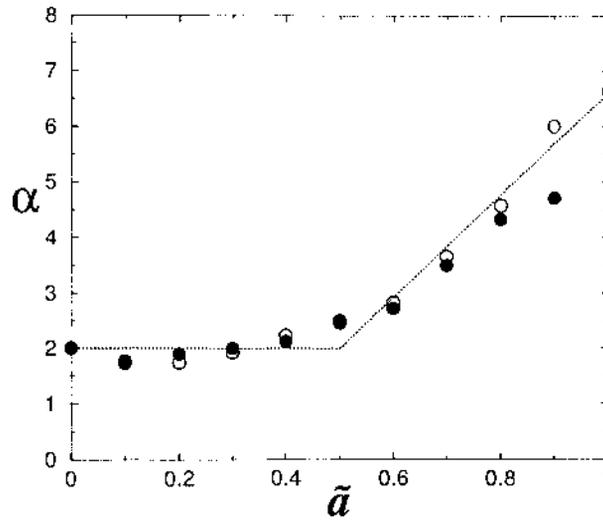


Figura 3.14: Comportamento de α em função de \tilde{a} , para $b = 0.2$ (círculos vazios) e $b = 0.5$ (círculos cheios). Por boa parte do regime de caos fraco α é praticamente constante e igual a 2.

Discutimos agora o caso de caos fraco. Na Fig. 3.14 calculamos o fator α que liga a análise quadridimensional associada ao crescimento de entropia com a informação unidimensional que provem da sensibilidade às condições iniciais, através da relação (veja a Eq. (3.35))

$$\alpha = \frac{1 - q_s}{1 - q_e}. \quad (3.40)$$

Para ambos os casos $b = 0.5$ e $b = 0.2$, a valores pequenos positivos de a corresponde um valor de α em torno de $\alpha \simeq 2$, como no caso degenerado. Isto indica que, para estes valores de \tilde{a} , o crescimento da porção do espaço de fases ocupada pelo ensemble é *essencialmente bidimensional*.

Neste ponto podemos formular uma conjectura para o caso mais geral em que o espaço de fases não é simétrico em relação ao intercâmbio de coordenadas, e entender de uma forma mais clara a razão da discrepância entre q_s e q_e . No caso de caos forte o crescimento do hipervolume que contem o *ensemble* fora do equilíbrio é essencialmente $d_M/2$ -dimensional. Com efeito, se $\{\lambda^{(k)}\}_{k=1,2,\dots,d_M/2}$ com $\lambda^{(k)} > 0 \forall k$ é o espectro de coeficientes de Lyapunov

positivos, e chamamos $\xi^{(k)}$ a sensibilidade às condições iniciais associada à direção que define $\lambda^{(k)}$, temos

$$W^{(d_M)}(t) \propto W^{(d_M/2)}(t) \propto \xi^{(1)}(t) \xi^{(2)}(t) \dots \xi^{(d_M/2)}(t) \quad (3.41)$$

$$\propto \exp(\lambda^{(1)}t) \exp(\lambda^{(2)}t) \dots \exp(\lambda^{(d_M/2)}t) \quad (3.42)$$

$$\propto \exp\left(\sum_{k=1}^{d_M/2} \lambda^{(k)}t\right). \quad (3.43)$$

Lembramos que $W^{(d_M)}(t)$ e $W^{(d_M/2)}(t)$ na Eq. (3.42) representam respectivamente o número de hipercélulas d_M - e $d_M/2$ -dimensionais ocupadas. Tomando o logaritmo desta relação obtemos a igualdade de Pesin

$$K = \sum_{k=1}^{d_M/2} \lambda^{(k)}, \quad (3.44)$$

onde $\ln W^{d_M/2}(t) = Kt$.

Se agora assumimos que a sensibilidade às condições iniciais ao longo das várias direções de expansão seja uma lei de potência $q^{(k)}$ -exponencial

$$\xi^{(k)} \propto t^{1/(1-q^{(k)})}, \quad (3.45)$$

as precedentes expressões se transformam em

$$W^{(d_M)}(t) \propto W^{(d_M/2)}(t) \propto \xi^{(1)}(t) \xi^{(2)}(t) \dots \xi^{(d_M/2)}(t) \quad (3.46)$$

$$\propto t^{1/(1-q^{(1)})} t^{1/(1-q^{(2)})} \dots t^{1/(1-q^{(d_M/2)})} \quad (3.47)$$

$$\propto t^{\sum_{k=1}^{d_M/2} 1/(1-q^{(k)})}, \quad (3.48)$$

e obtemos que $\ln_{q_e} W^{d_M/2}(t)$ é linear com o tempo para q_s tal que:

$$\frac{1}{1-q_e} = \sum_{k=1}^{d_M/2} \frac{1}{1-q^{(k)}}. \quad (3.49)$$

Note-se que, para $q^{(k)} < 1 \forall k$, temos $q_s > q^{(k)}, \forall k$. Note-se também que, para $q^{(k)} = q_s \forall k$ a Eq. 3.49 se reduz na Eq. 3.40 identificando $\alpha \equiv d_M/2$.

A Eq. 3.49 representa de uma certa forma uma elegante generalização da igualdade de Pesin (no sentido que associa uma informação ligada à produção de entropia a uma informação ligada à sensibilidade às condições iniciais) para sistemas dinâmicos que exibem caos fraco. Aplicando uma generalização do método tradicional para o cálculo do espectro completo dos coeficientes de Lyapunov [89], deveria ser possível verificar a validade desta relação [90].

3.3 Platôs quase-estacionários em mapas simpléticos

Voltamos agora a tratar o notável fenômeno da formação de platôs quase-estacionários, na literatura chamados também platôs meta-estáveis. Diferentemente do que acontece para os mapas unimodais e para os sistemas Hamiltonianos de muitos corpos com interação de longo alcance discutidos no próximo capítulo, para a dinâmica associada aos platôs dos mapas simpléticos não existem ainda conexões claras com o formalismo não-extensivo. Porém, pelo fato dos mapas serem Hamiltonianos e pelas semelhanças nas próprias equações dinâmicas, o estudo destes platôs fornece informações interessantes sobre os análogos platôs dos Hamiltonianos de muitos corpos. Uma evidência interessante é por exemplo o fato que a geometria associada aos platôs que discutimos nesta seção é, como para o caso dos mapas unimodais, de tipo fractal.

Nesta seção consideramos então o surgimento de platôs quase-estacionários em *ensembles* de mapas *standard* e de mapas *standard* acoplados simpleticamente [63, 64, 66]. Teremos também a oportunidade de discutir o que acontece se ao invés de considerar a evolução de um *ensemble* analisamos a evolução de uma única trajetória fazendo médias temporais [65].

3.3.1 Médias de ensemble

O surgimento de platôs quase-estacionários, no caso dos Hamiltonianos de muitos corpos com interação de longo alcance [59, 60, 63, 85, 86], mas também em outros sistemas com-

plexos como por exemplo os sistemas vítreos [87, 88], é tipicamente associado à escolha de classes particulares de dados iniciais. Começamos a nossa análise considerando o mapa *standard* Eq. (3.16) e observamos que os pontos $(0, 1/2)$ e $(1/2, 1/2)$ são um ciclo-2 para todo a . Podemos portanto utilizá-los como referencial para estudar propriedades do espaço de fases em relação a variações do parâmetro a . Com alguma semelhança com o caso dos Hamiltonianos de muitos corpos [59, 60, 85, 86] os nossos dados iniciais fora-do-equilíbrio são definidos, em $t = 0$, por um *ensemble estatística* de \mathcal{N} cópias do mapa *standard* com θ arbitrário e p distribuído aleatoriamente em uma pequena região em torno de $p = 1/2$ (na literatura estes dados iniciais são chamados do tipo “*waterbag*” [59]).

Usualmente, quando em mecânica estatística se analisam sistemas com matriz de energia cinética diagonal e valor médio nulo, a temperatura é proporcional à média do quadrado do momento por partícula. Como queremos discutir situações com movimento de *bulk* não nulo, o conceito análogo, que chamaremos de “*temperatura dinâmica*” (adimensional), pode ser definido através da *variância* do momento angular [64]:

$$T \equiv (\langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle) = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2, \quad (3.50)$$

onde $\langle \rangle$ significa média de *ensemble*. A qualificação *dinâmica* é usada porque esta definição provém meramente da dinâmica e não de um contato térmico com um termômetro. A temperatura associada com o *ensemble* uniforme no espaço de fases completo (que chamaremos de temperatura de BG, T_{BG} , pela semelhança com o postulado de igualdade *a priori* da probabilidade) é dada por

$$T_{BG} \equiv \int_0^1 dp p^2 - \left(\int_0^1 dp p \right)^2 = 1/12 \simeq 0.083. \quad (3.51)$$

É bom ressaltar que neste modelo conservativo, a “temperatura” T é necessariamente limitada, já que o próprio p é limitado, em contraste com uma verdadeira temperatura termodinâmica que obviamente é não-limitada.

Para grande valores de $|a|$ (caoticidade forte) no mapa (3.16), o sistema é tipicamente *mixing* e a temperatura do *waterbag* inicial relaxa rapidamente para T_{BG} . O nosso objetivo é estudar o que acontece na transição para a regularidade obtida reduzindo o valor de

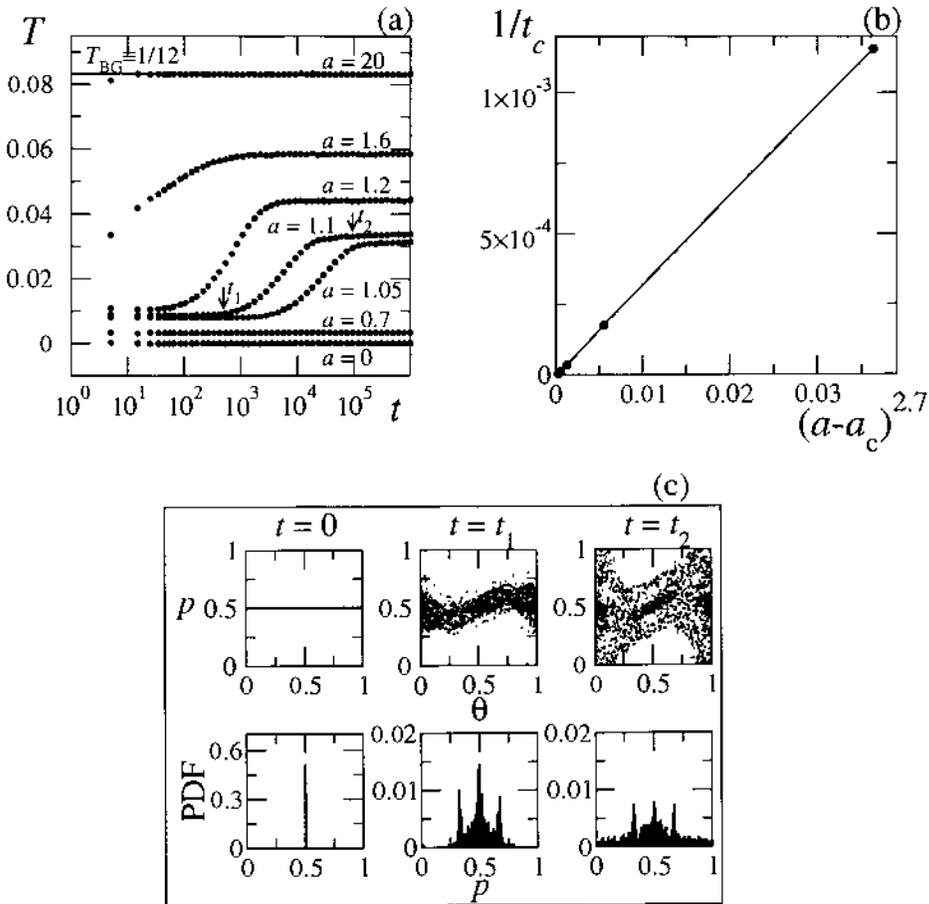


Figura 3.15: (a) Evolução temporal da temperatura dinâmica T de um mapa *standard*, para valores típicos de a . Os dados iniciais consistem em $N = 2500$ pontos com $0 \leq \theta \leq 1$, $p = 0.5 \pm 5 \cdot 10^{-4}$. Para eliminar flutuações cíclicas, os pontos representam médias de 10 passos de iteração e além disso cada curva representa uma média de 50 realizações. (b) Inverso do tempo de *crossover* t_c (ponto de inflexão entre o regime quase-estacionário e o regime de BG) em função de $1/(a - a_c)^{2.7}$. Notamos que não existe ponto de inflexão se t é representado linearmente. (c) Análise no espaço de fases da evolução temporal do *ensemble* em (a) para $a = 1.1$ (primeira linha) e distribuição de probabilidade do momento angular (segunda linha). $t = 0$: condições iniciais de tipo *waterbag*; $t = t_1 = 500$: o *ensemble* é confinado por *cantoros*; $t = t_2 = 10^5$: o *ensemble* é confinado por toros KAM.

$|a|$ para $a = 0$. Na Fig. 3.15(a) observamos que o primeiro efeito da redução de $|a|$ é que $\lim_{t \rightarrow \infty} T(t) < T_{BC}$. Isto pode ser facilmente entendido em termos da teoria KAM. Reduzindo a caoticidade, barreiras totais constituídas por toros KAM aparecem no espaço de fases. Como consequência, os pontos do *ensemble* são impedidos de alcançar todas as regiões do espaço de fases e a projeção do *ensemble* sobre o eixo p produz uma distribuição de probabilidade com uma variância menor do que aquela da distribuição uniforme.

Para valores de a da ordem $a \sim 1$, surge um estado quase-estacionário antes da relaxação para a temperatura final. De fato, dentro do mar estocástico começam aparecer barreiras parciais constituídas por *cantoros*, e os dados iniciais primeiro difundem rapidamente dentro da área delimitada por estes *cantoros* e em seguida fazem um lento *crossover* para a temperatura de relaxação final. A Fig. 3.15(c) ilustra este comportamento. Para obter uma descrição quantitativa do tempo de relaxação representamos o tempo em uma escala logarítmica. Definimos o tempo de *crossover* t_c como o ponto de inflexão da curva e observamos que este tempo diverge, se a tende a $a_c = 0.971635406\dots$ para valores maiores, como $t_c \sim 1/(a - a_c)^{2.7}$ (veja a Fig. 3.15(b)). Com efeito, logo abaixo deste valor crítico, os *cantoros* mais fortes se fecham [82], e uma relaxação para uma temperatura maior é impossibilitada. Com a redução de a para valores ainda menores se formam mais barreiras totais, de modo que a temperatura dinâmica tende a zero se $|a| \rightarrow 0$.

Pelo mecanismo que descrevemos, fica claro que é possível obter este tipo de estados quase-estacionários mesmo com outros conjuntos de dados iniciais. Tipicamente, é suficiente ter os dados iniciais localizados dentro da região onde ficam as primeiras barreiras parciais. Em outras palavras, existe uma *bacia atratora* de dados iniciais fora do equilíbrio que caracteriza este tipo de estados meta-estáveis.

Como observamos anteriormente, a topologia do espaço de fases de mapas simpléticos muda de modo dramático se a dimensão é maior de 2. Para discutir este caso, passamos agora ao caso quadridimensional caracterizado por dois mapas *standard* acoplados através das Eqs. (3.24). Notamos que para este caso, se fixamos $b = 2$ os pontos $(0, 1/2, 0, 1/2)$ e $(1/2, 1/2, 1/2, 1/2)$ são um ciclo-2 para qualquer (a_1, a_2) , e desta maneira preservamos um referencial no espaço de fases, útil para definir as condições iniciais. De qualquer maneira,

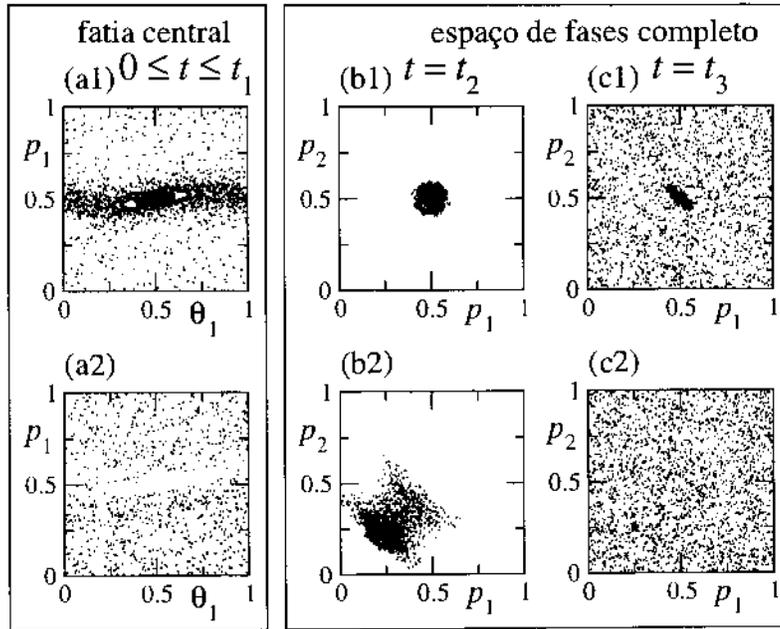


Figura 3.16: Análise no espaço de fases da evolução de *ensembles* para dois mapas *standard* acoplados com $(\tilde{a}, b) = (0.4, 2)$. Primeira linha: condições iniciais $0 \leq \theta_1, \theta_2 \leq 1$, $p_1, p_2 = 0.5 \pm 5 \cdot 10^{-3}$. Segunda linha: condições iniciais $0 \leq \theta_1, \theta_2 \leq 1$, $p_1, p_2 = 0.25 \pm 5 \cdot 10^{-3}$. (a) Projeção no plano (θ_1, p_1) de uma fatia central do espaço de fases $(\theta_2, p_2 = 0.5 \pm 10^{-2})$, pela órbita $0 \leq t \leq t_1 = 10^4$. (b),(c) Projeção no plano (p_1, p_2) de todo o espaço de fases para os iterados ao tempo $t_2 = 15$ e $t_3 = 2 \cdot 10^4$.

para valores gerais de b todos os resultados relevantes que discutiremos são qualitativamente os mesmos. Fixamos também $a_1 = a_2 \equiv \tilde{a}$, de modo que o sistema é invariante sob permutações $1 \leftrightarrow 2$. Já que agora temos dois rotores, a temperatura dinâmica se generaliza naturalmente através da definição

$$T \equiv \frac{1}{2} (\langle p_1^2 \rangle + \langle p_2^2 \rangle - \langle p_1 \rangle^2 - \langle p_2 \rangle^2), \quad (3.52)$$

assim, a temperatura de BG continua sendo

$$T_{BG} \equiv 1/12 \simeq 0.083. \quad (3.53)$$

Analogamente ao caso anterior, consideramos como dados iniciais um *ensemble* de \mathcal{N} pontos com (θ_1, θ_2) arbitrário, e momento angular distribuído dentro de uma pequena região em torno de $p_1 = p_2 = 1/2$ (configuração de tipo *waterbag*). O resultado é qualitativamente similar a aquele exibido no caso bidimensional da Fig. 3.15(a) para $a > a_c$. Grandes valores de \tilde{a} correspondem a T_{BG} e reduzindo \tilde{a} observamos a formação de estados quase-estacionários que, depois de um certo tempo, relaxam para uma temperatura $T < T_{BG}$. A primeira diferença importante em relação ao caso bidimensional é que, devido aos processos difusivos de Arnold, a relaxação para uma temperatura maior acontece (esperando um tempo suficiente) para *todos* $\tilde{a} \neq 0$ (ou seja, $\tilde{a}_c = 0$, definindo \tilde{a}_c como o valor onde t_c diverge). Além disso, a razão pela qual o *ensemble* não relaxa para a temperatura de BG para valores pequenos de \tilde{a} é neste caso bem diferente que no caso bidimensional. De fato, com a escolha feita pelos dados iniciais, eles interceptam pelo menos uma ilha macroscópica (como se pode ver claramente na Fig. 3.16 (a1)): os pontos que são inicialmente colocados dentro desta ilha não podem se difundir fora dela. Como resultado, a projeção do *ensemble* no plano p_1, p_2 conserva uma parte central mais densa em todos os tempos (Fig. 3.16 (b1), (c1)).

Porém, se trasladamos o *waterbag* inicial por exemplo na parte inferior do espaço de fases, podemos colocar os pontos fora desta ilha (Fig. 3.16 (a2)-(c2)). Neste caso obtemos um novo fenômeno crucial: a formação, para valores pequenos de \tilde{a} , de estados quase-estacionários que finalmente relaxam para a temperatura de BG (veja a Fig. 3.17(a)).

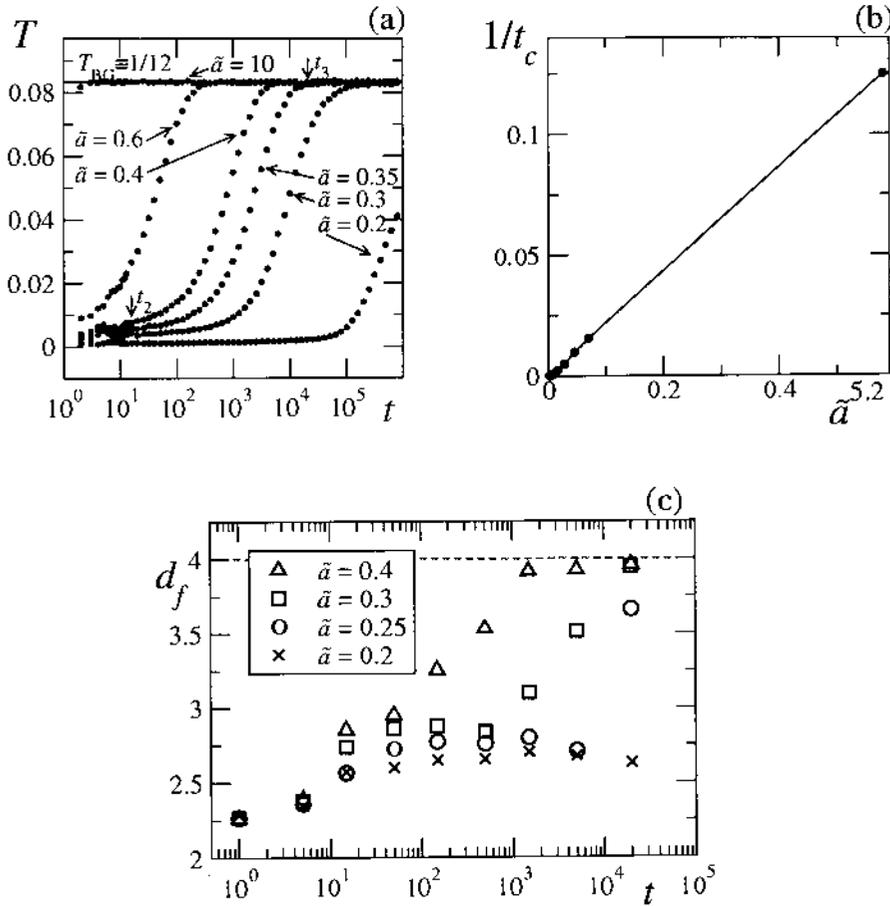


Figura 3.17: (a) Evolução temporal da temperatura dinâmica T para dois mapas *standard* acoplados, com $b = 2$ e valores típicos de \tilde{a} . Começamos com os dados iniciais: $\mathcal{N} = 1296$ pontos com $0 \leq \theta_1, \theta_2 \leq 1$ e $p_1, p_2 = 0.25 \pm 5 \cdot 10^{-3}$. Os dados representam uma média sobre 35 realizações. Veja a Fig. 3.16 para t_2 e t_3 . (b) Inverso do tempo de *crossover* t_c em função de $1/\tilde{a}^{5.2}$. (c) Evolução temporal da dimensão fractal de um único *ensemble* na mesma configuração em (a).

Note-se também que o tempo de *crossover* t_c diverge, por $\tilde{a} \rightarrow 0$, mais rapidamente do que no caso bidimensional: $t_c \sim 1/\tilde{a}^{5.2}$ (veja Fig. 3.17(b)).

Uma observação muito importante é que a relaxação para a temperatura de BG acontece aqui mesmo se a presença de ilhas no espaço de fases *viola* o postulado de igualdade *a priori* da probabilidade. Em outras palavras, temos uma violação *fraco* do postulado que preserva uma distribuição uniforme uma vez que o *ensemble* é projetado sobre o plano p_1, p_2 , de modo parecido a como uma esponja projeta uma sombra uniforme sobre uma parede. Estes estados quase-estacionários podem com efeito serem geometricamente caracterizados pela *dimensão fractal* d_f . Resolvendo algumas dificuldades numéricas ligadas a uma análise fractal em 4 dimensões, ilustramos este efeito na Fig. 3.17(c), realizada usando um algoritmo de “contagem de caixas” [91] (o espaço de fases exibe de fato fortes heterogeneidades que sugerem a presença de uma estrutura multifractal). Durante o estado meta-estável, ou seja, para \tilde{a} pequeno, o *ensemble* é associado a uma dimensão fractal não trivial $d_f \simeq 2.7$, porém, depois do *crossover* para o regime de BG, se distribui ocupando toda a dimensionalidade do espaço de fases, alcançando assim $d_f = 4$.

Estes simples modelos permitem também a discussão de outros tipos de estados quase-estacionários. Por exemplo, em $t = 0$ podemos considerar uma configuração de duplo *waterbag* definindo um *ensemble* de \mathcal{N} cópias de dois mapas *standard* acoplados (3.24) com (θ_1, θ_2) arbitrário e momentos angulares distribuídos de forma aleatória dentro de *duas* pequenas regiões: $p_1, p_2 = 0 + \delta$ e $p_1, p_2 = 1 - \delta$ ($0 < \delta \ll 1$). Neste caso, a temperatura inicial $T(0)$ é maior de T_{BG} , porque a distribuição de probabilidade projetada nos eixos p_1, p_2 tem um duplo pico. A relaxação para T_{BG} acontece então *de cima para baixo*, como se pode ver na Fig. 3.18. Esta é exatamente a diferença entre o fenômeno observado em [85, 86] e aquele em [59], para os sistemas Hamiltonianos de muitos corpos com interação de longo alcance.

É relevante observar que, em consequência da difusão de Arnold, estes resultados para o mapa 4-dimensional capturam o comportamento qualitativo de mapas simpléticos de dimensão maior. Com efeito, a estrutura de dois platôs é confirmada numericamente em análises com centenas de mapas *standard* globalmente acoplados como em Eq. (3.24) [63].

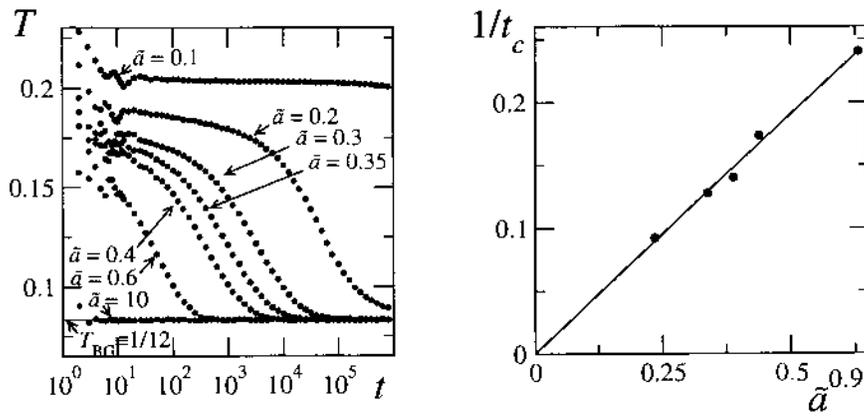


Figura 3.18: Igual à Fig. 3.17(a),(b) mas com condições iniciais com duplo *waterbag*: $0 \leq \theta_1, \theta_2 \leq 1$; p_1, p_2 aleatoriamente distribuídos dentro umas das duas regiões $p_1, p_2 = 0 + 10^{-2}$, $p_1, p_2 = 1 - 10^{-2}$.

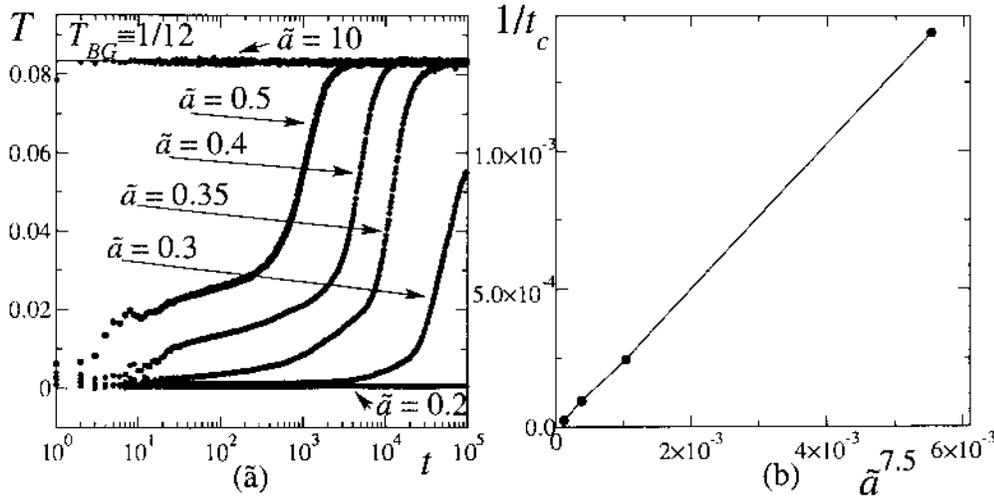


Figura 3.19: Estados quase-estacionários em $N = 100$ mapas *standard* acoplados. (a) $T(t)$ para $b = 2$ e valores típicos de \tilde{a} . Começamos com os dados iniciais: $\mathcal{N} = 500$ pontos com $0 \leq \theta_i \leq 1$ e $p_i = 0.25 \pm 5 \cdot 10^{-3} \forall i = 1, 2, \dots, N$. (b) Inverso do tempo de t_c em função de $1/\tilde{a}^{7.5}$.

Especificamente, consideramos agora o caso de N mapas *standard* globalmente acoplados, de modo simplético, através das equações

$$\begin{aligned} \theta_i(t+1) &= p_i(t+1) + \theta_i(t) + \frac{b}{N-1} \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq i}}^N p_m(t+1) \pmod{1}, \\ p_i(t+1) &= p_i(t) + \frac{\tilde{a}}{2\pi} \sin[2\pi\theta_i(t)] \pmod{1}, \end{aligned} \quad (3.54)$$

onde $i = 1, 2, \dots, N$. Em seguida, fixamos a constante de acoplamento $b = 2$ e usamos $a \in \mathbb{R}$ para controlar a caoticidade. A escolha de uma constante de acoplamento global entre os N mapas *standard* é devida à intenção de obter propriedades de evolução dinâmica similares a aquelas dos sistemas Hamiltonianos de muitos corpos com interação de longo alcance. A definição de temperatura dinâmica se generaliza naturalmente em

$$T(t) \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N ((\overline{p_i^2(t)}) - (\overline{p_i(t)})^2), \quad (3.55)$$

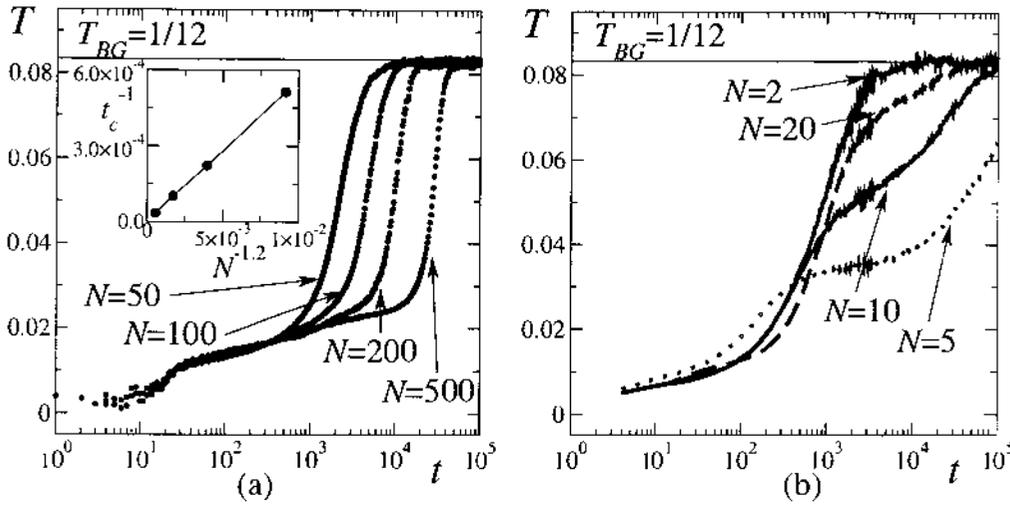


Figura 3.20: Lei de escala do tempo de *crossover* com o número de mapas *standard* acoplados. Os dados iniciais são definidos como em Fig. 3.19. (a) $T(t)$ para $\bar{\alpha} = 0.4$, $b = 2$ e grandes valores de N . Na figura inserida: inverso do tempo de *crossover* t_c em função de $1/N^{1.2}$. (b) $T(t)$ para $\bar{\alpha} = 0.4$, $b = 2$ e valores pequenos de N .

de modo que a temperatura de BG continua valendo

$$T_{BG} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[\int_0^1 dp_i p_i^2 - \left(\int_0^1 dp_i p_i \right)^2 \right] = 1/12 \simeq 0.083 \quad (\forall N). \quad (3.56)$$

Também neste caso consideramos como dados iniciais um *ensemble* de \mathcal{N} pontos com θ_i arbitrário e p_i numa pequena região na parte inferior do intervalo $[0, 1)$, para todos os valores de i . A Fig. 3.19(a) apresenta resultados para o caso de dimensão $d_M = 200$ obtido acoplando globalmente $N = 100$ mapas *standard*. A familiar estrutura de dois platôs persiste para grandes valores de N . Resultados preliminares sugerem que, de fato, mesmo para grandes valores de N se desenvolve um primeiro platô com $d_f/d_M < 1$ [92]. Este fato reforça a possibilidade de existência de um conjunto de dados iniciais de medida não nula para quais o sistema é mantido dinamicamente em um subconjunto do espaço de fases completo, e somente depois ocupa todo o espaço permitido em relação aos dados iniciais, adotando como consequência uma estatística de tipo BG. Este comportamento é

tanto mais pronunciado quanto mais o coeficiente máximo de Lyapunov é próximo a zero.

Um outro ponto a observar é que neste caso também o tempo de *crossover* para o regime de BG diverge se $\tilde{a} \rightarrow 0$, como mostrado na Fig. 3.19(b). Como consequência temos que se considerar o limite $t \rightarrow \infty$ depois do limite $\tilde{a} \rightarrow 0$, a temperatura associada a estes *ensembles* é sempre $T_{QSS} \neq T_{BG}$. O mesmo resultado é obtido se, fixando \tilde{a} , analisamos o escalamento do tempo de *crossover* para grandes N (veja a Fig. 3.20(a) onde fixamos $\tilde{a} = 0.4$). Além disto, o expoente na relação de rescalamento $t_c \sim N^{1.2}$ é muito próximo daquele encontrado para o modelo Hamiltoniano de muitos corpos com interação de longo alcance apresentado no próximo capítulo: $t_c \sim N$ [59]. É também interessante notar que, para o caso que estamos discutindo, este escalamento é eficaz somente para grande valores de N (digamos, $N > 20$). Para N pequeno, um comportamento mais complexo aparece (veja a Fig. 3.20(b)). Em particular, para $N = 5$ observamos uma evidência parecida com aquela mostrada pelo mapa logístico com ruído aditivo, ou seja uma estrutura de platôs múltiplos.

3.3.2 Médias temporais

Nesta seção voltamos a considerar os casos de baixa dimensão de um e dois mapas *standard* acoplados, estudando *médias temporais* associadas aos estados quase-estacionários descritos na seção precedente [65]. Chamaremos de “caso (A)” o sistema definido por um único mapa *standard* Eq. (3.16), cujo espaço de fases tem dimensão $d = 2$, e de “caso (B)” a análise de dois mapas simpléticos acoplados Eq. (3.24), cujo espaço de fases tem dimensão $d = 4$. Estas médias temporais são obtidas seguindo o comportamento de uma única trajetória, de uma maneira parecida ao modo como um termômetro integra temporalmente as interações com o sistema, para fornecer a medida da temperatura. O intento é ter mais indicações sobre o comportamento dinâmico destes estados meta-estáveis, especialmente em relação às propriedades relacionadas à ergodicidade.

Dada uma função dinâmica f que tem diferentes valores $f(\mathbf{x}(0), t)$ ao longo de uma única trajetória começada no ponto do espaço de fases $\mathbf{x}(0)$, definimos a sua média temporal

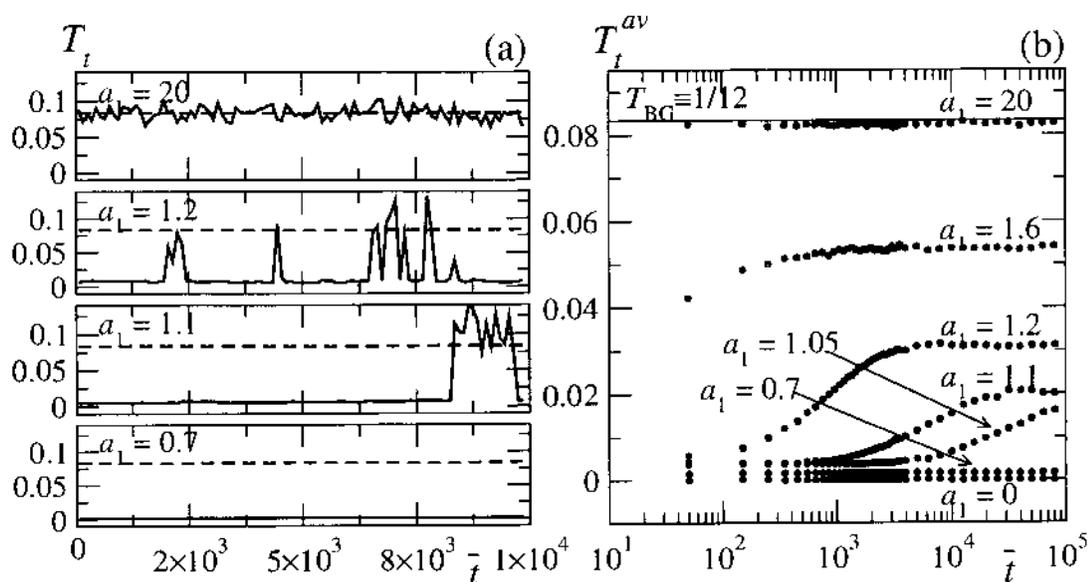


Figura 3.21: Caso (A) – Estados quase-estacionários analisados com médias temporais num mapa *standard*. (a) $T_t(\bar{t})$ para valores típicos de a . Evolução de uma única órbita iniciada em $\mathbf{x}(0) = (0.3, 0.5)$, com um intervalo de observação $t_o = 10^2$. Linhas tracejadas indicam T_{BG} . (b) Médias para 10^5 realizações do tipo em (a), com dados iniciais dentro de $0 \leq \theta \leq 1$. $p = 0.5 \pm 5 \cdot 10^{-4}$.

$\bar{f}(\mathbf{x}(0), \bar{t}, t_o)$ no tempo $t = \bar{t}$ durante o tempo de observação $t_o \equiv t_f - t_i$ como

$$\bar{f}(\mathbf{x}(0), \bar{t}, t_o) \equiv \frac{\sum_{t=t_i}^{t=t_f} f(\mathbf{x}(0), t)}{t_f - t_i}, \quad (3.57)$$

onde t_i e t_f são respectivamente os tempo inicial e final de observação, e $\bar{t} \equiv t_i + t_o/2$. Esta definição reproduz a ação de um detector que teste o sistema ao longo de uma porção de uma determinada trajetória. Neste contexto, a definição de temperatura dinâmica é reproduzida por

$$T_t(\mathbf{x}(0), \bar{t}, t_o) \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\overline{p_i^2} - \bar{p}_i^2 \right), \quad (3.58)$$

onde o subíndice t serve para lembrar que desta vez a temperatura dinâmica é definida através de médias temporais. Em seguida consideramos dados iniciais $\mathbf{x}(0)$ no interior das regiões usadas para definir os dados iniciais na análise de médias de *ensemble*, evitando a possibilidade de definir $\mathbf{x}(0)$ dentro de ilhas. Novamente, para distribuições de momentos angulares uniformes no espaço de fases completo durante o intervalo de observação t_o , obtemos

$$T_t = T_{BG}. \quad (3.59)$$

Quando o sistema é suficientemente caótico, como era esperado, T_t oscila em torno de T_{BG} . De outro lado, se $|a|$ (caso **(A)**) ou $|\bar{a}|$ (caso **(B)**) são reduzidos, T_t exhibe, em lugar da estrutura de dois platôs, um *comportamento intermitente* (veja as Fig. 3.21(a) e 3.22(a) respectivamente). Isto indica a presença de *seqüências de barreiras parciais*, ao longo da trajetória no espaço de fases, que alternam processos difusivos rápidos e lentos. Note-se que T_t pode pular para valores maiores de T_{BG} (ou seja, a variância da distribuição temporal do momento angular total pode tornar-se maior do que aquela de uma distribuição uniforme).

Uma outra quantidade interessante é o valor médio de $T_t(\mathbf{x}(0), \bar{t}, t_o)$, calculado para diferentes órbitas $\mathbf{x}(0)$:

$$T_t^{av}(\bar{t}, t_o) \equiv (T_t)_{\mathbf{x}(0)}. \quad (3.60)$$

Obviamente, T_t^{av} coincide com a temperatura dinâmica definida através de médias de *ensemble* Eq. (3.55) para $t_o = 1$, enquanto para $t_o \gg 1$ representa o resultado médio de diferentes medidas do hipotético detector, e se trata de um observável típico calculado

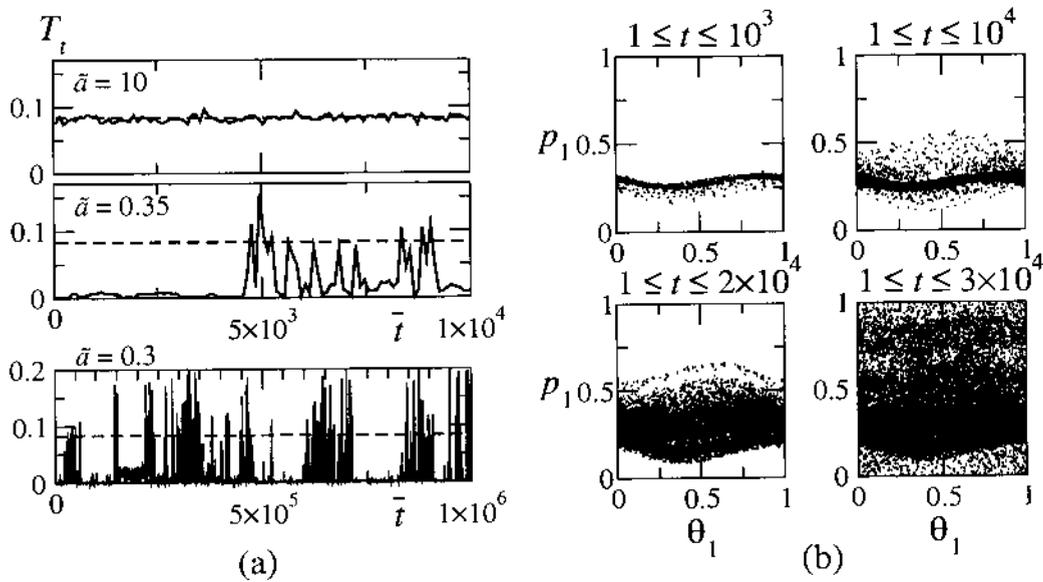


Figura 3.22: Caso (B) – Estados quase-estacionários analisados com médias temporais em dois mapas *standard* acoplados. (a) $T_t(\bar{t})$ para $b = 2$ e valores típicos de $\tilde{\alpha}$. Evolução para uma única órbita começada em $\mathbf{x}(0) = (0.5, 0.25, 0.8, 0.25)$, com um intervalo observacional $t_o = 10^2$. Linhas tracejadas indicam T_{BG} . (b) Análise no espaço de fases da trajetória em (a) para $\tilde{\alpha} = 0.3$. Pontos representam a projeção da órbita no plano (θ_1, p_1) .

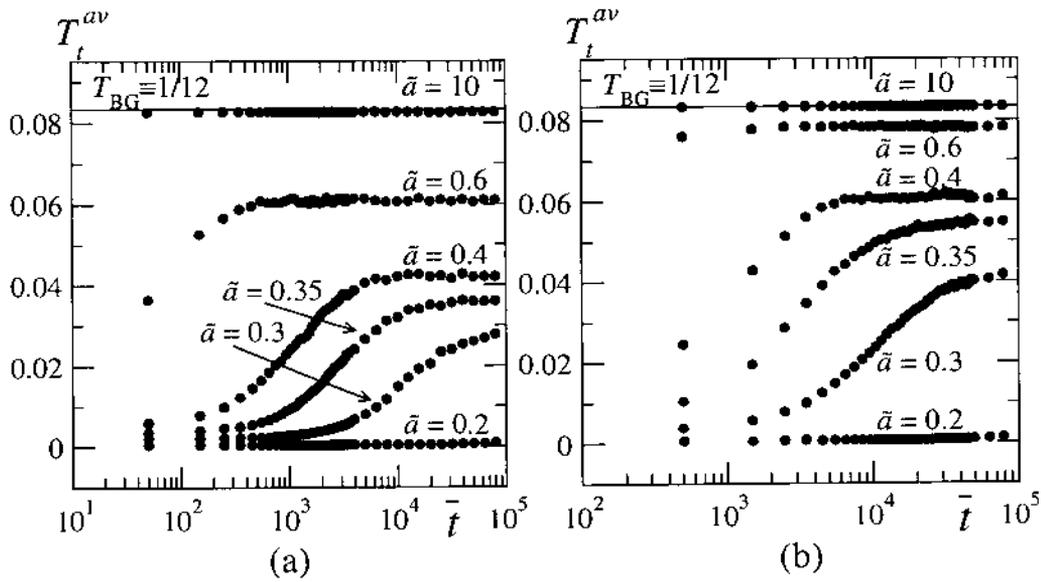


Figura 3.23: Caso (B) – Estados quase-estacionários analisados com médias temporais em dois mapas *standard* acoplados. $T_t^{av}(\bar{t})$ obtida fazendo a média sobre 10^5 realizações do tipo em Fig. 3.22. com dados iniciais dentro $0 \leq \theta_1, \theta_2 \leq 1, p_1, p_2 = 0.25 \pm 5 \cdot 10^{-3}$. (a) O intervalo de observação é $t_o = 10^2$. (b) O intervalo de observação é $t_o = 10^3$.

nas análises de ergodicidade (veja, por exemplo, [4]). As Figs. 3.21(b) e 3.23(a) mostram que neste caso obtemos um comportamento qualitativamente equivalente ao das médias de *ensemble* das Fig. 3.15(a) e Fig. 3.17(a), mas tipicamente com *temperaturas menores*. É bastante interessante observar que 3.23(b) mostra uma tendência de T_t^{av} a aproximar a temperatura dinâmica definida através de médias de *ensemble* Eq. (3.55), ao crescer de t_o .

Capítulo 4

Sistemas conservativos II:

Hamiltonianos de muitos corpos

Neste capítulo continuamos com a nossa “tendência” em aumentar a dimensão do espaço de fases, para tentar de comparar os conhecimentos conseguidos no estudo dos modelos mais simples de baixa dimensão, com modelos dinâmicos cada vez mais próximos a sistemas reais macroscópicos. Passamos a estudar aqui modelos Hamiltonianos de tempo contínuo constituídos por muitos corpos interagentes entre eles ao longo de uma cadeia unidimensional. Primeiro vamos considerar o caso de interação de primeiros vizinhos para poder exibir, através de uma nova técnica de cálculo numérico, a fundamentação dinâmica do ensemble canônico de BG [58]. Passamos depois a descrever [60, 61, 63] várias anomalias dinâmicas (com notáveis semelhanças com os fenômenos exibidos nos capítulos anteriores) que aparecem quando se passa a analisar uma interação de longo alcance. Tentaremos enfim de utilizar a técnica numérica [58] para o estudo dos platôs quase-estacionários que aparecem no caso de interações de longo-alcance. Como veremos, este caso é muito mais difícil e cheio de sutilezas que o de curto-alcance. Apresentamos resultados preliminares, fruto de um trabalho em andamento [42], porém suficientemente avançados para confirmar a não-aplicabilidade do formalismo tradicional de BG para a descrição destes estados, e para sugerir um cenário interessante onde buscar respostas mais definitivas.

4.1 Fundamentação dinâmica do ensemble canônico de Boltzmann-Gibbs

O problema da fundamentação dinâmica da mecânica estatística de BG foi levantado já na época da proposta original deste poderoso formalismo (veja, por exemplo, [2]). Porém, apesar de importantes resultados, a solução para esta questão fundamental [93] ainda apresenta aspectos básicos em aberto (veja, por exemplo, [3, 4, 5, 6] e referências sugeridas). Graças ao atual desempenho dos computadores, podemos integrar numericamente as equações de Hamilton para sistemas de tamanho razoavelmente grandes e comparar os resultados com as predições do formalismo de BG. Embora esta técnica foi implementada com sucesso numa perspectiva microcanônica (dinâmica molecular), quando se analisam sistemas em contato com um termóstato se utilizam normalmente outros métodos que impõem uma dinâmica *ad hoc* (como por exemplo a técnica Monte Carlo). Nesta seção introduzimos um novo método [58] que permite a discussão da distribuição canônica, *diretamente* no espaço de Γ de Gibbs, na base das equações de movimento. Usando dois paradigmáticos modelos Hamiltonianos não lineares com interação de primeiros vizinhos — o ferromagneto XY inercial unidimensional e o modelo β de Fermi-Pasta-Ulam — encontramos notáveis resultados, os quais fornecem uma fundamentação dinâmica do formalismo canônico de BG que ainda não foi exibida claramente [3, 4, 5, 6]. Dentro desta abordagem, tanto médias temporais como médias de *ensemble* são realizadas dinamicamente, de maneira que podemos discutir a ergodicidade. A este respeito, observaremos que o calcular (somente) o máximo coeficiente de Lyapunov não é suficiente para obter uma medida consistente das propriedades de relaxação envolvidas com a ergodicidade. O nosso cálculo numérico pode ser implementado para sistemas que satisfazem a definição dos livros de texto do *ensemble* canônico (como parte de um sistema isolado maior). É interessante discutir a mesma abordagem em situações onde, devido por exemplo a presença de termos de longo alcance, se encontram importantes desvios das predições da teoria de BG (veja a seção 4.2).

Dadas algumas condições macroscópicas no espaço de fases do sistema em exame (o

espaço Γ), o valor médio de uma função dinâmica pode ser definido usando médias *temporais* ou de *ensemble*; se a hipótese ergódica é válida, estes dois métodos são equivalentes. Observamos que *ambas* as abordagens podem ser realizadas dinamicamente. No primeiro caso focaliza-se uma única realização dinâmica e a probabilidade p_R de se encontrar o sistema dentro de uma região R do espaço Γ é definida pela fração temporal t_R transcorrida pelo sistema dentro dessa região, durante o tempo total τ (eventualmente infinito) passado pela sua trajetória no espaço de fases completo:

$$p_R^t \equiv t_R/\tau, \quad (4.1)$$

onde o super-índice t significa abordagem de média *temporal*. A segunda abordagem é realizada por exemplo fixando-se um determinado instante de tempo t^* e repetindo a evolução dinâmica até o tempo t^* , sob as mesmas condições iniciais macroscópicas (mas com diferentes condições microscópicas). Contando o número de vezes n_R que o sistema é encontrado dentro da região R ao tempo t^* , em relação do número total de vezes n (eventualmente infinito) que o cálculo foi executado, se pode definir

$$p_R^e \equiv n_R/n, \quad (4.2)$$

onde o super-índice e indica abordagem de média de *ensemble*. No caso da interação de longo-alcance discutido na seção 4.2.3 usaremos também uma abordagem mista entre estas duas, definindo (com alguma analogia com a análise da seção 3.3.2)

$$p_R^{t,e} \equiv \frac{\sum_{i=1}^n t_R^i}{n\tau}, \quad (4.3)$$

onde t_R^i é o tempo que o sistema passa na região R durante a realização i ($i = 1, 2, \dots, n$). Claramente, para $\tau \gg n$ ($\tau \ll n$) $p_R^{t,e}$ aproxima a abordagem temporal (de *ensemble*).

Para um típico sistema Hamiltoniano de N -corpos (*típico* no sentido que satisfaz às prescrições de BG) com energia fixa E_N (configuração microcanônica), uma introdução padrão do *ensemble* canônico é obtida definindo o sistema canônico como composto por um subconjunto de M corpos interagentes entre eles, com $1 \ll M \ll N$. A energia dos M elementos satisfaz $E_M \ll E_N$, e a energia de interação entre o sistema canônico e o

resto do sistema isolado (*banho térmico*) é suposta ser muito menor que E_M . Sob estas hipóteses, a probabilidade p_j de encontrar o sistema num M -microestado j é dada pela previsão de equilíbrio de BG

$$p_j \propto e^{-\beta E_j}, \quad (4.4)$$

onde $\beta \equiv 1/T$ é o inverso da temperatura (sem perda de generalidade aqui também assumimos uma constante de Boltzmann unitária), e E_j é a energia do microestado. Uma abordagem dinâmica para confirmar este resultado deve enfrentar a seguinte dificuldade numérica. Já que o espaço Γ é Md dimensional (d sendo a dimensão do espaço de fases da partícula única), se consideramos, para implementar o *coarse-graining*, por exemplo uma partição de k intervalos em cada coordenadas, o número total de (hiper)células Ω_M é da ordem k^{Md} . Só para colocar algum número indicativo para um cálculo concreto, com $k = 4$, $M = 100$ e $d = 2$ temos $\Omega_M \sim 4^{200} \sim 10^{120}$. Deveríamos então implementar uma integração numérica de $2N (>> 200)$ equações de Hamilton para um tempo total τ (ou um número de realizações n) muito maior de 10^{120} , o que vai além do que podemos atualmente conseguir numericamente.

Podemos porém seguir um caminho alternativo e, ao invés de abordar a probabilidade associada a um microestado, podemos considerar a probabilidade de encontrar o sistema canônico com uma dada energia E_M . Neste caso a resposta do formalismo de BG é

$$p(E_M) = \frac{\omega(E_M)e^{-\beta E_M}}{Z}, \quad (4.5)$$

onde Z é a função de partição e

$$\omega(E_M) = \int \prod_{i=1}^M (dp_i dq_i) \delta[E_M - H_M(p_i, q_i)] \quad (4.6)$$

é a densidade de estados no espaço de fases na energia E_M ; $\omega(E_M)$ pode ser estimado *analiticamente* através da relação termodinâmica que liga a entropia estatística à temperatura

$$\frac{\partial \ln \omega(E)}{\partial E} = \beta(E). \quad (4.7)$$

Integrando esta relação temos que $\omega(E_M)$ é dado através da *curva calórica* $T(E)$:

$$\frac{\omega(E_M)}{\omega(E_0)} = \exp \left[\int_{E_0}^{E_M} dE' \beta(E') \right], \quad (4.8)$$

onde E_0 é a energia do estado fundamental. Resumindo, a estrutura Hamiltoniana do sistema define a densidade de estados em função da energia; uma vez que esta relação é conhecida, é suficiente multiplicar $\omega(E_M)$ pelo fator de Boltzmann $e^{-\beta E_M}$ e normalizar, para se obter $p(E_M)$ para todo o espectro de temperaturas. Agora, o cálculo dinâmico de $p(E_M)$ é muito mais fácil do que para p_j . Tudo o que temos que fazer é integrar numericamente as equações de Hamilton e calcular o valor da energia E_M para o subconjunto canônico, a cada passo de integração. Podemos então realizar um *coarse-graining* do espectro de energias dividindo-o em intervalos de largura ΔE_M e construir um histograma normalizado do número de ocorrências de cada um destes intervalos. Em analogia com a discussão anterior,

$$p^t(E_M) \equiv \frac{t(E_M)}{\tau \Delta E_M} \quad \text{e} \quad p^e(E_M) \equiv \frac{n(E_M)}{n \Delta E_M} \quad (4.9)$$

representam então a probabilidade de encontrar o sistema canônico com a energia E_M , usando respectivamente médias temporais e de *ensemble*.

Para ilustrar este cálculo, consideramos em seguida uma classe específica de Hamiltonianos não-lineares com interação de primeiros vizinhos, que podem ser resolvidos analiticamente:

$$H_N = K_N + V_N = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2} + V(q_{i+1} - q_i) \right], \quad (4.10)$$

com condições de contorno periódicas ($q_{N+1} \equiv q_1$). Como primeiro caso consideramos uma cadeia unidimensional de rotores com um potencial

$$V(q_{i+1} - q_i) \equiv 1 - \cos(q_{i+1} - q_i), \quad (4.11)$$

onde as coordenadas canônicas $q_i \in [0, 2\pi)$ e $p_i \in \mathbb{R}$ são respectivamente as coordenadas angulares e os momentos angulares dos rotores cujo momento de inércia é unitário. Esta Hamiltoniana é uma versão inercial do modelo ferromagnético de spins *XY*, e constitui um protótipo dinâmico para modelos de spins em mecânica estatística [4, 5, 6, 94]. Com efeito, em contraste com os modelos de spin tipo Ising, este modelo permite o estudo do comportamento dinâmico incrementalmente integrando as equações de Hamilton, sem precisar de prescrições *ad-hoc*. Uma outra possível interpretação da Hamiltoniana é dada por partículas

com a mesma massa que se movem no círculo unitário. Nesta interpretação, q_i representa a posição no círculo e p_i é o seu momento conjugado. No nosso caso (ferromagnético), as partículas se atraem e para pequenas distâncias pode-se pensar que elas chocam elasticamente entre si, ou que simplesmente se interpenetram como se fossem “transparentes”, já que todas têm a mesma massa. O modelo é quase-integrável tanto para baixas como para altas energias. O primeiro regime é definido para $T \lesssim 0.1$ (energia específica $e \lesssim 0.1$) [5] e é chamado *regime de acoplamento forte*, já que os rotores constituem um conjunto de osciladores harmônicos acoplados quase linearmente. O segundo caso é obtido para $T \gtrsim 10$ ($e \gtrsim 6$) [5], onde os rotores são quase livres (*regime de acoplamento fraco*). A função canônica usual

$$Z_M = \int \prod_{i=1}^M (dp_i dq_i) \exp[-\beta H_M(p_i, q_i)], \quad (4.12)$$

produz, para este modelo, a energia livre específica

$$f \equiv - \lim_{M \rightarrow \infty} \left[\frac{\ln Z_M}{M\beta} \right] \quad (4.13)$$

(veja a apêndice A.1):

$$f = -T \left[\frac{1}{2} \ln T + \ln I_0\left(\frac{1}{T}\right) + \ln 2\pi^{\frac{3}{2}} \right] + 1, \quad (4.14)$$

onde $I_0(x)$ é a função modificada de Bessel da primeira espécie de ordem zero. Usando a relação

$$E(T) = F - T \frac{\partial F}{\partial T} \quad (4.15)$$

e tomando a inversa, obtém-se a curva calórica de BG $T(e)$ (veja a Fig. A.1), onde

$$e \equiv \lim_{M \rightarrow \infty} E_M/M. \quad (4.16)$$

Uma vez que a temperatura é um parâmetro *intensivo*, rescalando o eixo x de um fator M e usando a Eq. (4.8), temos $\omega(E_M)$ para qualquer valor (grande mas finito) de M .

Na Fig. 4.1(a) representamos o logaritmo de $\omega(E_M)$ para os rotores a primeiros vizinhos com $M = 100$, enquanto a Fig. 4.1(b) mostra a mesma função na escala log-log. Note-se que em correspondência dos dois regimes assintóticos de baixa e alta energia temos

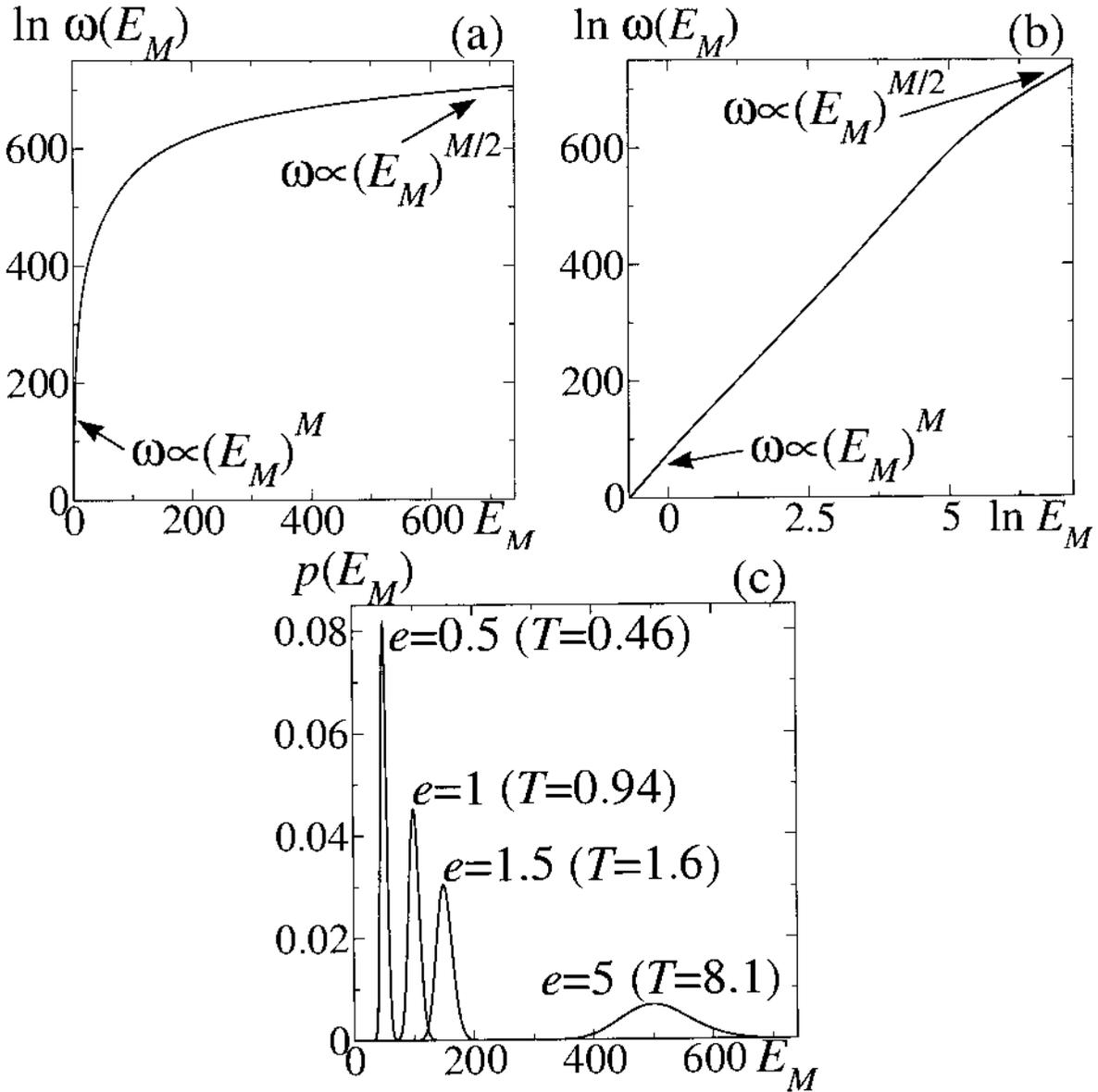


Figura 4.1: Predição analítica canônica de BG para o ferromagneto inercial XY com $M = 100$. (a) Gráfico log-linear da densidade de estados $\omega_M(E_M)$. (b) Gráfico log-log da densidade de estados $\omega_M(E_M)$. Note-se os regimes assintóticos integráveis de baixa e alta energia, com $\omega_M(E_M) \propto (E_M)^M$ e $\omega_M(E_M) \propto (E_M)^{M/2}$ respectivamente. (c) $p(E_M) \equiv \omega_M(E_M) \exp(-E_M/T)/Z$, para diferentes temperaturas.

respectivamente $\omega_M(E_M) \propto (E_M)^M$ e $\omega_M(E_M) \propto (E_M)^{M/2}$. A Fig. 4.1(c) exhibe a predição de *ensemble* canônico para $p(E_M)$, obtida multiplicando a densidade de estados por o fator de Boltzmann, para diferentes valores da temperatura T (ou da energia específica e). Notamos que, graças às propriedades elementares da função logarítmica, é possível realizar este cálculo para valores bastante grandes de M , já que essencialmente se trabalha com os expoentes.

Realizamos a integração dinâmica das equações de Hamilton usando o integrador simplético de ordem 4 de Neri-Yoshida [95] com um parâmetro de iteração que garante uma conservação da energia da ordem $\Delta E_N/E_N \simeq 10^{-3}$ (algumas realizações com 10^{-5} mostraram que 10^{-3} é suficiente para os nossos objetivos). Um ponto importante para realizar um cálculo eficiente é relacionado com as condições iniciais, que devem ser suficientemente próximas do equilíbrio para evitar longos transientes. Uma vez que o sistema não evidencia nenhuma transição de fases para $T > 0$ mas apresenta uma tendência ao agrupamento (*clustering*) para baixas temperaturas, utilizamos uma distribuição Maxwelliana para os momentos angulares (com a apropriada temperatura) e um conjunto de l Gaussianas equidistantes para os ângulos, cada uma com a mesma variância propriamente ajustada para fornecer a desejada energia total E_N . Nos nossos cálculos foi suficiente usar $l = 6$ para obter uma relaxação suficientemente rápida para todas as nossas configurações (microcanônicas). Para todos os nossos resultados esperamos 10^3 iterações antes de começar as medidas para um sistema canônico composto de um subconjunto de M rotores adjacentes.

Na Fig. 4.2(a-c) apresentamos um notável acordo entre a predição analítica de BG para $p(E_M)$ (linha contínua) e a estimativa dinâmica de $p^e(E_M)$ (cruzes) para várias ordens de magnitude da energia específica e (incluindo os regimes de acoplamento forte e fraco) com uma configuração $(M, N) = (10^2, 10^3)$ e um número total de realizações $n = 5 \times 10^6$. Por outro lado, as $p^l(E_M)$ (círculos), calculados com um número total de iterações $\tau = 5 \times 10^7$, mostram um bom acordo em relação da distribuição analítica de BG para baixa energia (incluindo o regime de acoplamento forte), mas começam a mostrar largas discrepâncias quando se entra no regime de acoplamento forte. Para quantificar estas diferenças, definimos a *discrepância* $0 \leq \epsilon \leq 2$ entre duas distribuições de probabilidade como a integral

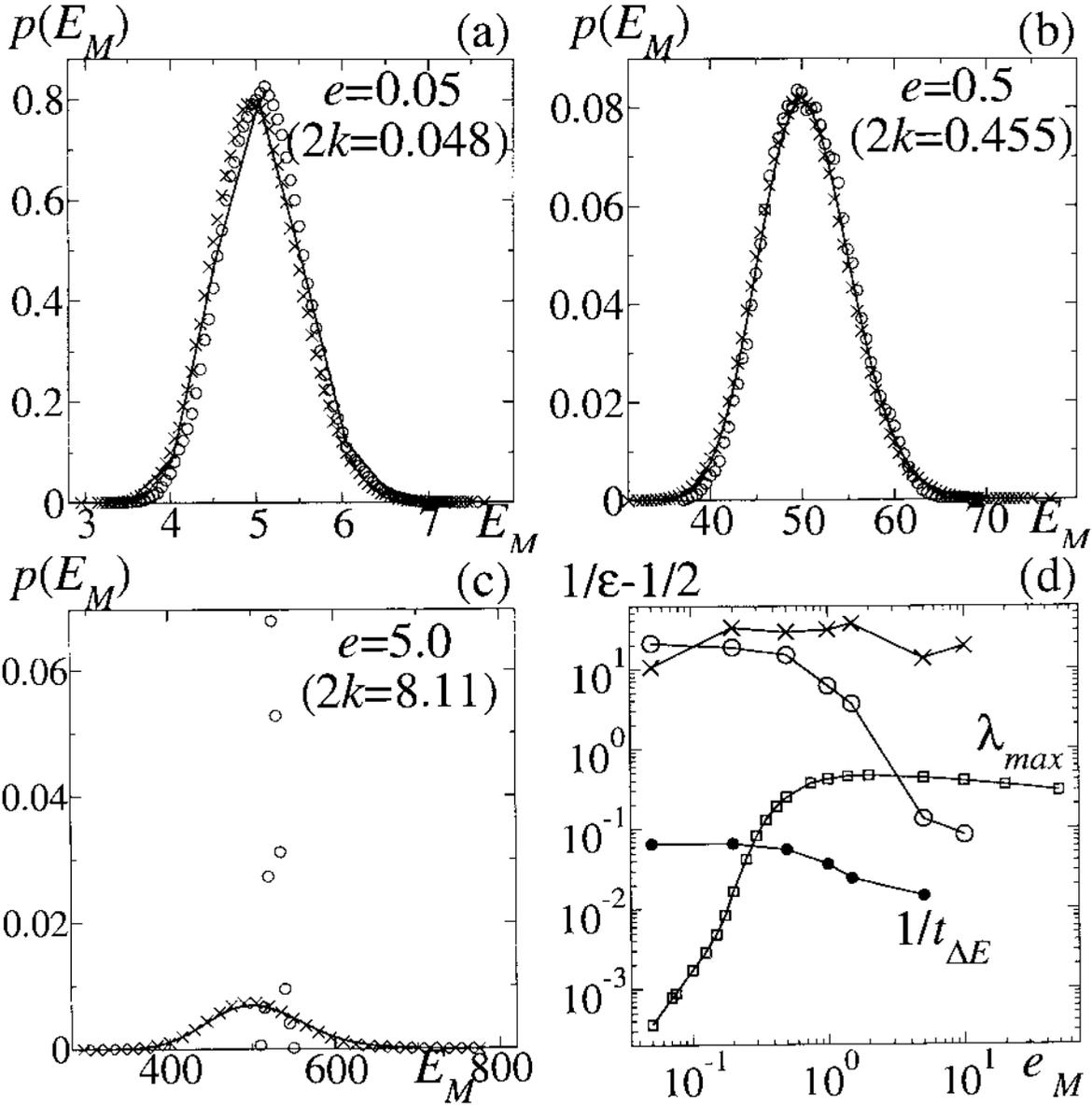


Figura 4.2: (a-c) Comparação entre a predição de BG $p(E_M)$ (linhas contínuas), a média dinâmica de ensemble $p^e(E_M)$ (cruzes), e a média dinâmica temporal $p^t(E_M)$ (círculos). $k \equiv K_M/M$ é o valor da energia cinética específica. (d) Análise de discrepância para $p^e(E_M)$ e $p(E_M)$ (cruzes), e $p^t(E_M)$ e $p(E_M)$ (círculos vazios). Representamos também o coeficiente máximo de Lyapunov λ_{max} (quadrados) e o inverso da escala temporal para uma flutuação normal $1/t_{\Delta E_M}$ (círculos cheios). As linhas são guias pelo olho. Veja o texto para detalhes.

do valor absoluto da diferença das distribuições. Para permitir uma comparação com o coeficiente máximo de Lyapunov, na Fig. 4.2(d) representamos a quantidade

$$0 \leq 1/\epsilon - 1/2 \leq \infty \quad (4.17)$$

tanto para as médias de *ensemble* como para as médias temporais, em relação com a predição analítica de BG. Enquanto para as médias de *ensemble* $1/\epsilon - 1/2$ é razoavelmente grande e praticamente constante com a energia, para as médias temporais esta quantidade apresenta um decrescimento dramático para grandes energias. Isto é devido ao fato que o tempo necessário para se ter uma flutuação normal da energia do subconjunto canônico

$$\Delta E_M \sim \frac{E_M}{\sqrt{M}} \quad (4.18)$$

crece com a energia (veja os círculos vazios em Fig. 4.2(d), onde mostramos o inverso deste tempo), em conseqüência do fato que os rotores são cada vez mais livres (devido ao fato do potencial ser superiormente limitado). Observamos que, contrariamente a um pensamento comum, o máximo coeficiente de Lyapunov (quadrados na Fig. 4.2(d)) pode se aproximar de *zero*, como no caso de baixa energia, enquanto o tempo que caracteriza a relaxação de $p^t(E_M)$ (círculos em Fig. 4.2(a-c)) para a distribuição de BG $p(E_M)$ fica *finito* (veja [4, 5] para discussões interessantes sobre este ponto).

Um resultado importante é a coincidência entre o valor T da temperatura de BG e duas vezes a energia cinética específica $k \equiv K_M/M$, dentro de um erro máximo do 2%. O acordo entre a dinâmica e o fator de Boltzmann aparece ainda mais claramente na regressão linear da Fig. 4.3, onde representamos

$$\ln \left[\frac{p^e(E_M)}{\omega(E_M)} \right] \quad (4.19)$$

para as médias de *ensemble* da Fig. 4.2(a-c). Notamos também que consideramos outros valores de (M, N) , precisamente $(50, 500)$ e $(10^3, 10^4)$, obtendo qualitativamente os mesmo resultados.

Obtemos também uma confirmação dos nossos resultados implementando o mesmo esquema de cálculo para o modelo β de Fermi-Pasta-Ulam, definido pelo potencial

$$V(q_{i+1} - q_i) \equiv \frac{(q_{i+1} - q_i)^2}{2} + 0.1 \frac{(q_{i+1} - q_i)^4}{4} \quad (4.20)$$

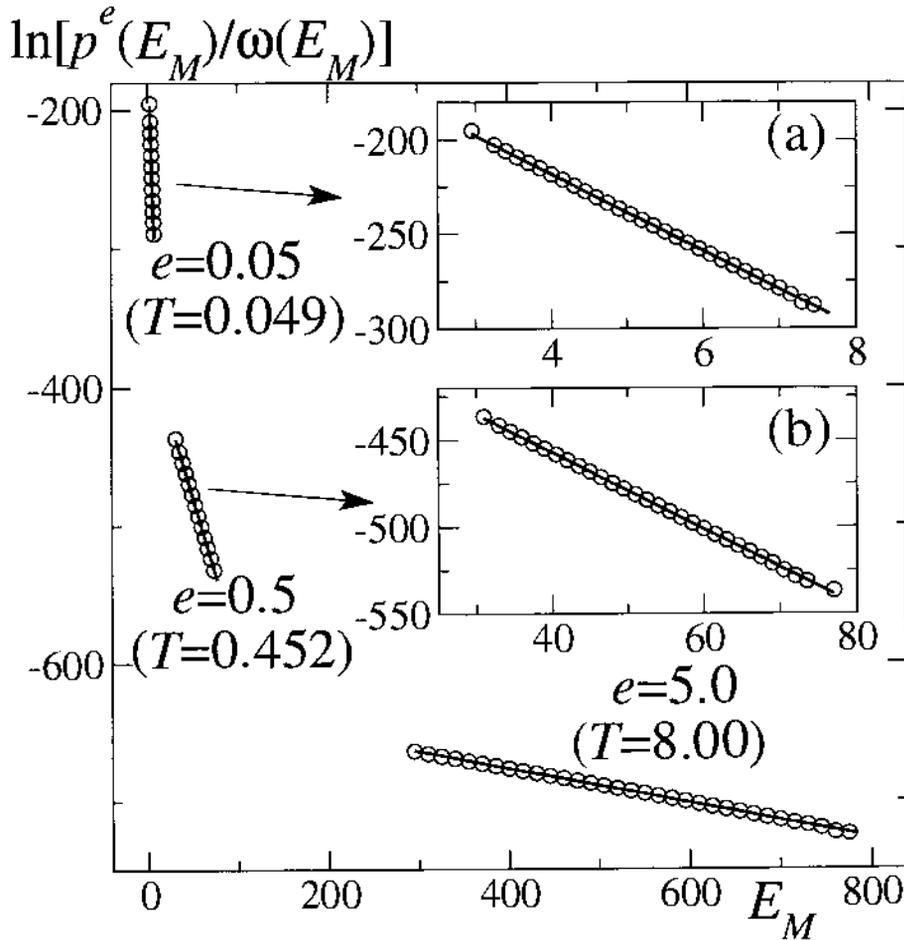


Figura 4.3: Evidência dinâmica do fator de Boltzmann. Representamos $\ln[p^e(E_M)/\omega(E_M)]$ para as médias de *ensemble* da Fig. 4.2 (círculos). T é o recíproco da inclinação de regressões lineares (linhas contínuas) sobre os dados. As figuras inseridas (a) e (b) mostram uma amplificação dos resultados para $e = 0.05$ e $e = 0.5$ respectivamente.

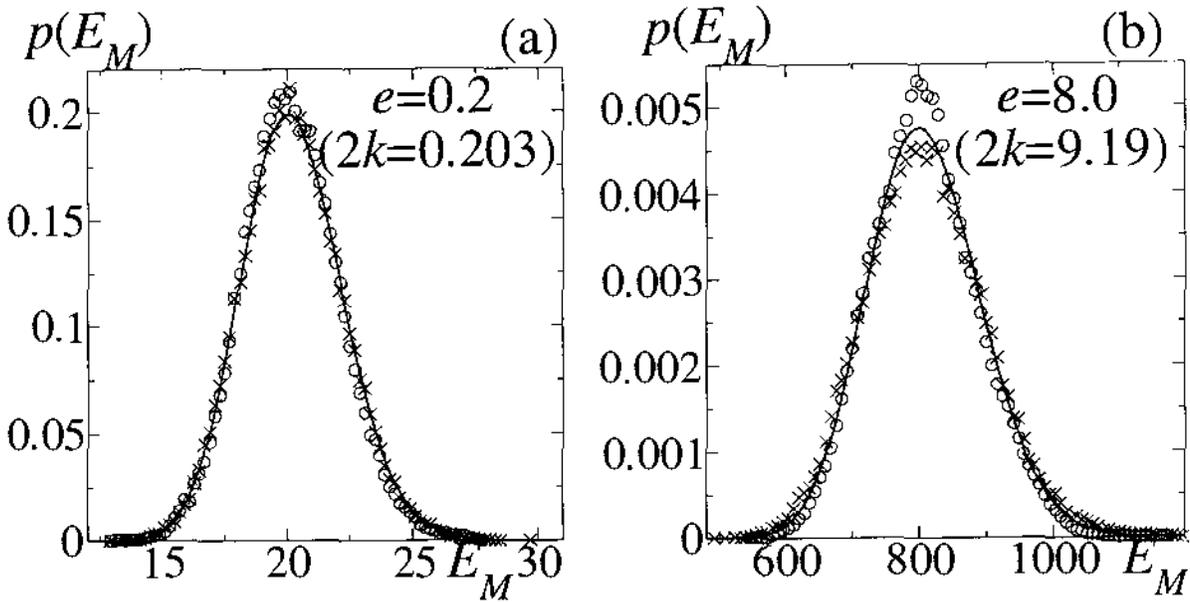


Figura 4.4: Igual a Fig. 4.2(a-c) para o modelo β de Fermi-Pasta-Ulam.

com $q_i \in \mathbb{R}$ (veja a apêndice B pela solução analítica do modelo e [4] para uma discussão de dados iniciais perto do equilíbrio), como mostrado na Fig. 4.4. Aqui também, para baixas energias, $p^t(E_M)$ está em bom acordo com a predição de BG embora o máximo coeficiente de Lyapunov [4] tenda para zero.

4.2 Platôs quase-estacionários em sistemas de longo alcance

Sistemas com interação de longo alcance representam atualmente um tópico de ponta na pesquisa em muitas áreas da física (entre outras, astrofísica, física nuclear, física do plasma, condensação de Bose-Einstein, agrupamento atômico, hidrodinâmica) [96]. Estes sistemas fornecem também a oportunidade de estudos interdisciplinares, através de exemplos paradigmáticos que permitem a comparação de analogias e diferenças entre abordagens alternativas.

Em particular, existem resultados interessantes que exibem inequivalências entre abor-

tagens de mecânica estatística de BG e métodos de sistemas dinâmicos [59, 85, 97]. Com efeito, nos últimos anos uma intensa atividade de pesquisa tem sido dedicada à investigação de aspectos de dinâmica microscópica em conexão com fenômenos macroscópicos. Em particular, vários autores focalizaram a atenção na caracterização, de um ponto de vista dinâmico, de transições de fases macroscópicas [6, 98, 99, 100, 101]. Em geral, a caoticidade é de importância fundamental para que o sistema possa alcançar o equilíbrio. Anomalias são esperadas quando isto não acontece, já que pode ocorrer uma quebra de ergodicidade e o sistema pode ficar preso em alguma região do espaço de fases. A este respeito, um modelo cujas características se revelaram bastante interessantes é o modelo Hamiltoniano de muitos corpos chamado modelo *Hamiltoniano de campo médio* (HCM), junto com as suas generalizações onde o alcance das interações pode ser mudado. O modelo foi introduzido na referência [102] e amplamente estudado em [59, 102, 103, 104, 105, 106, 107, 108, 109, 110, 111, 112]. Um artigo de revisão das propriedades de equilíbrio deste sistema, do ponto de vista dinâmico e termodinâmico, se encontra em [97]. O nosso enfoque [61, 63] será sobre as anomalias encontradas no regime fora do equilíbrio, com o surgimento de um platô quase-estacionário antes do *crossover* para o regime de BG [59], e sobre a questão de como este comportamento anômalo pode ser relacionado à mecânica estatística não-extensiva. Discutiremos também a validade do princípio zero da termodinâmica durante o platô meta-estável [60], ferramenta teórica fundamental para poder tentar uma abordagem canônica para a descrição deste estado. Na última seção do capítulo analisaremos esta abordagem [42].

4.2.1 Anomalias dinâmicas e relações com o formalismo não-extensivo

O modelo HCM descreve um sistema de N spins planares (como na seção 4.1) que interagem através de um potencial de alcance infinito [102]. A Hamiltoniana pode ser escrita como

$$H = K + V = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^N [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)], \quad (4.21)$$

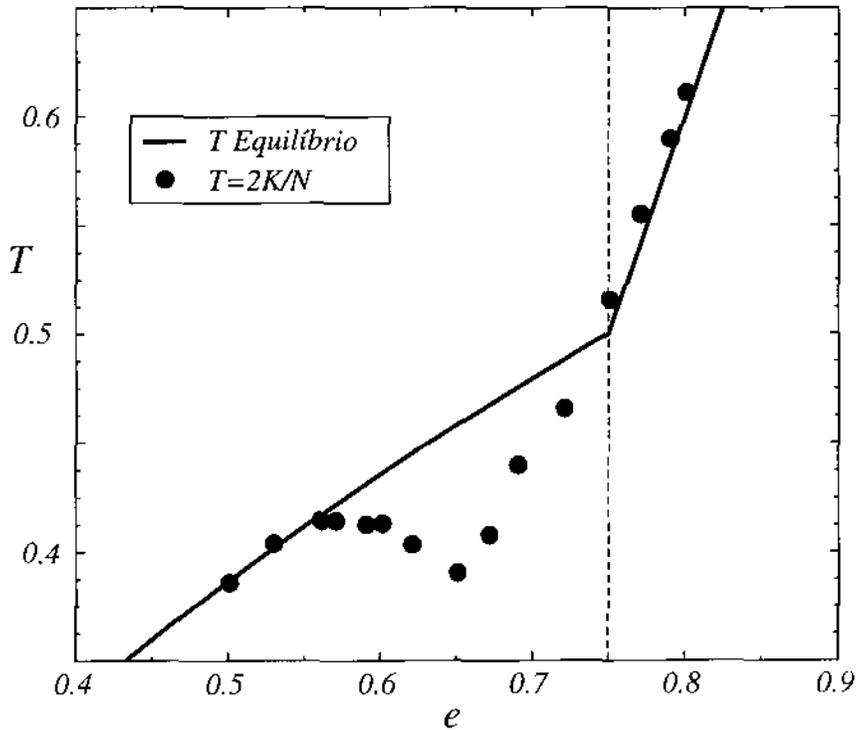


Figura 4.5: Comparamos a curva calórica de equilíbrio do modelo HCM (curva contínua) com a simulação numérica para um sistema de tamanho $N=500$. A integração numérica das equações de Hamilton é realizada até um certo tempo, logo depois da entrada do sistema no regime de estado quase-estacionário.

onde $\theta_i \in [0, 2\pi)$ é o i -ésimo ângulo e $p_i \in \mathbb{R}$ a variável canonicamente conjugada que representa o momento angular da velocidade de rotação, já que se assume que o momento de inércia é unitário. A interação é a mesma do modelo XY ferrimagnético, mas a soma é estendida para todas as duplas de spins e não restrita somente aos primeiros vizinhos. Na literatura é comum (mesmo não sendo necessário [106]) seguir o procedimento de Kac [97, 113] e dividir por N a constante de acoplamento no potencial. Isto faz com que H seja extensivo apenas formalmente ($V \sim N$ no limite $N \rightarrow \infty$) [33, 106, 107, 108], já que a energia permanece não-aditiva, ou seja, o sistema não pode ser dividido trivialmente em dois subsistemas independentes.

A solução canônica analítica do modelo (veja a apêndice A.2) prevê uma transição

de fase da segunda ordem. Para baixa energia o sistema está numa fase ferromagnética caracterizada por uma magnetização $m \sim 1$, onde m é o módulo de

$$\mathbf{m} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i, \quad (4.22)$$

com

$$\mathbf{m}_i \equiv [\cos(\theta_i), \sin(\theta_i)]. \quad (4.23)$$

Aumentando a energia além de um valor crítico, os spins passam a ser orientados homogeneamente e $m \sim 0$. A *curva calórica*, ou seja, a dependência da densidade de energia $e \equiv E/N$ em relação à temperatura T , é dada por

$$e = \frac{T}{2} + \frac{1}{2}(1 - m^2) \quad (4.24)$$

e é mostrada em Fig. 4.5 através de uma linha contínua. O ponto crítico é para a densidade de energia $e_c = 0.75$ correspondendo a uma temperatura crítica $T_c = 0.5$ [102].

O comportamento dinâmico fora do equilíbrio do modelo HCM médio pode ser investigado em uma configuração microcanônica considerando por exemplo dados iniciais do tipo *waterbag* nas velocidades e com magnetização 1, ou seja, com as velocidades distribuídas aleatoriamente dentro de um intervalo $[-\bar{p}, \bar{p}]$ (onde $\bar{p}(e)$ depende da energia específica que estamos considerando) e $\theta_i = 0 \forall i$ ($m = 1$). As equações de movimento podem depois ser integradas numericamente usando um integrador simplético [95]. Como mostrado na Fig.4.5, o valor de duas vezes a energia cinética específica $k \equiv K/N$ calculado nas simulações numéricas microcanônicas em geral está em bom acordo com o valor da temperatura da predição analítica de *ensemble* canônico de equilíbrio, com exceção de uma região logo abaixo de e_c , onde foi encontrada uma dinâmica caracterizada também por vãos de Lévy, difusão anômala [104] e um calor específico negativo [105]. Inequivalências de *ensemble* e calor específico negativo foram também encontradas em sistemas auto-gravitacionais [114] e em agregados atômicos e de núcleos [115, 116, 117, 118]. No nosso caso estas anomalias surgem como características de um transiente dinâmico, embora exista uma versão generalizada do modelo HCM [101, 97] em que parece que estas anomalias persistam no regime de equilíbrio de BG.

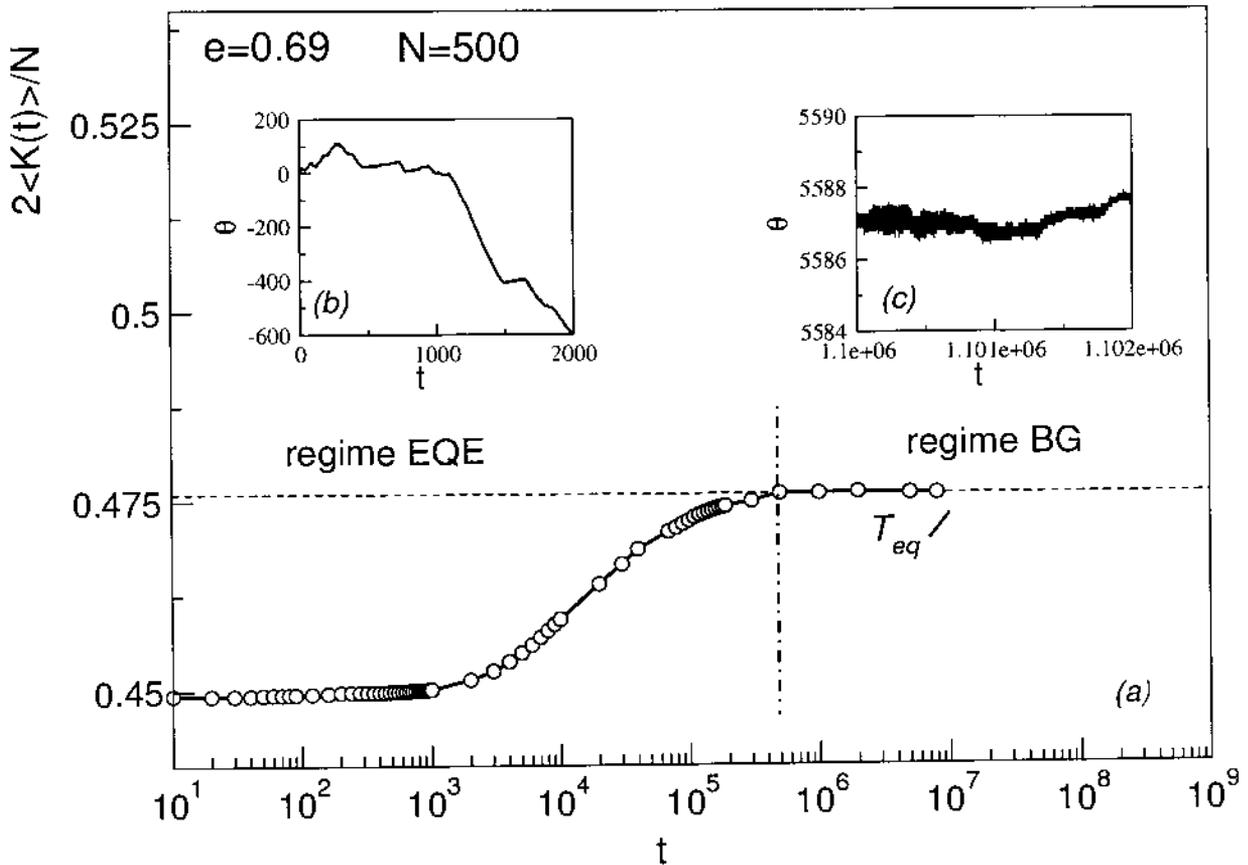


Figura 4.6: Para o modelo HCM com $e = 0.69$ e $N = 500$, representamos a energia cinética específica em função do tempo. Deste cálculo surgem dois platôs. O primeiro é um estado quase-estacionário, enquanto o segundo corresponde ao regime de equilíbrio de BG. Nesta figura apresentamos dados que são resultados médios de muitas realizações; mesmo se este valor médio ajuda para uma melhor visualização do estado quase-estacionário, como se pode ver na Fig. 4.11 esta técnica não é estritamente necessária. Na figura inserida (b) mostramos o ângulo em função do tempo para um rotor típico no regime quase-estacionário: o movimento evidencia vôos de Lévy e difusão anômala [104]. Na figura inserida (c) mostramos o movimento de uma partícula no regime de equilíbrio de BG: o movimento é um *caminho aleatório*.

Para analisar com mais detalhe esta discrepância, restringimos agora a nossa atenção sobre um valor particular da energia específica, precisamente $e = 0.69$ (logo abaixo da energia crítica), e estudamos a evolução temporal da energia cinética específica, da magnetização e das distribuições de velocidades. Em Fig. 4.6 mostramos a evolução temporal de duas vezes energia cinética específica k para $e = 0.69$ e $N = 500$. Esta quantidade, em equilíbrio, coincide com a temperatura. A figura mostra que quando a simulação numérica é iniciada fora do equilíbrio (no nosso caso com dados iniciais do tipo *waterbag* com magnetização 1), $2k$ alcança rapidamente um estado quase-estacionário (EQE) que não coincide com a predição de *ensemble* canônico de BG. Depois de um breve transiente, não exibido na figura, $2k$ exibe um platô que corresponde a uma temperatura que depende de N , $T_{EQE}(N)$ (com $m_{EQE} \simeq 0$, $m \rightarrow 0$ se $N \rightarrow \infty$), mais baixa do que a temperatura canônica. Este estado meta-estável precisa de um longo tempo para relaxar à temperatura do estado de equilíbrio canônico de BG, caracterizado por uma temperatura $T_{BG} = 0.476$ e uma magnetização $m_{BG} = 0.307$. Na mesma figura representamos o movimento de uma única partícula típica nas duas figuras inseridas. Na figura inserida (b) o movimento é caracterizado por difusão anômala e vôos de Lévy com velocidade constante [104]. Este movimento é bem descrito por um modelo introduzido na referência [119]. Estas características mudam quando o sistema alcança o equilíbrio (veja a figura inserida (c)), onde o movimento torna-se um caminho aleatório padrão e a difusão é normal.

Na referência [104] foi encontrado que a vida útil do estado meta-estável e o tempo de *crossover* entre a difusão anômala e a difusão normal coincidem dentro do limite da precisão numérica adotada. Por outro lado, a duração do platôs cresce com o tamanho do sistema. Com efeito, o tempo de vida do estado quase-estacionário tem uma dependência linear com N , exatamente como no caso dos platôs associados aos mapas simpléticos discutidos no capítulo precedente. Isto é mostrado na Fig.4.7 onde são representados resultados de simulações para diferentes condições iniciais fora do equilíbrio. Estes resultados numéricos indicam que os dois limites $t \rightarrow \infty$ e $N \rightarrow \infty$ não comutam: se o limite termodinâmico é realizado antes do limite de tempo infinito, o sistema não relaxa ao equilíbrio de BG e as anomalias discutidas anteriormente permanecem para sempre (se note que esta situação é

tipicamente associada a fenômenos de metaestabilidade). De fato, características parecidas foram encontradas também para vidros de spin [87, 88] e matéria granular [120, 121] e podem provavelmente ser interpretadas dentro de um cenário teórico geral. Quando N cresce, $T_{EQE}(N)$ tende para um valor bem definido que é

$$T_{\infty} = 0.38. \quad (4.25)$$

Este valor é obtido analiticamente como o prolongamento meta-estável, para energias abaixo de $e_c = 0.75$, do ramo de alta-energia da curva calórica caracterizado por $m = 0$. É importante ressaltar que recentes resultados [122] mostraram, para condições iniciais tipo *waterbag* com *magnetização zero*, que abaixo de cerca $e \simeq 0.69$ o prolongamento da curva com $m = 0$ não é mais estável. Na referência [59] foi também encontrado que

$$[T_{EQE}(N) - T_{\infty}] \propto N^{-1/3}. \quad (4.26)$$

Esta relação de escala, usando a expressão para curva calórica, implica numa relação de escala para a magnetização, que tende a zero como

$$m_{EQE} \propto N^{-1/6}. \quad (4.27)$$

Uma outra verificação numérica desta relação foi obtida na referência [123].

Neste ponto é importante discutir o comportamento do coeficiente de Lyapunov em função de N e do tempo, para investigar se esta medida mostra também alguma anomalia. Com efeito, é isto o que acontece, já que o coeficiente máximo de Lyapunov λ exibe dois regimes temporais e particularmente dois platôs. Na Fig.4.8 representamos a evolução de λ para o caso $e = 0.69$ e $N = 500$. A simulação numérica é o resultado de uma média de mais de 350 eventos e mostra que durante o regime meta-estável o coeficiente máximo de Lyapunov é menor que no equilíbrio de BG. Na figura inserida mostramos a lei de escala de λ no estado quase-estacionário em função do tamanho do sistema: aumentando N , λ_{EQE} tende a zero com $N^{-1/9}$ [123]. A lei de escala para o coeficiente máximo de Lyapunov pode ser relacionada à lei de escala da magnetização como foi discutido na referência [123]. O fato que $\lambda \rightarrow 0$ para $N \rightarrow \infty$ implica que a sensibilidade às condições iniciais é

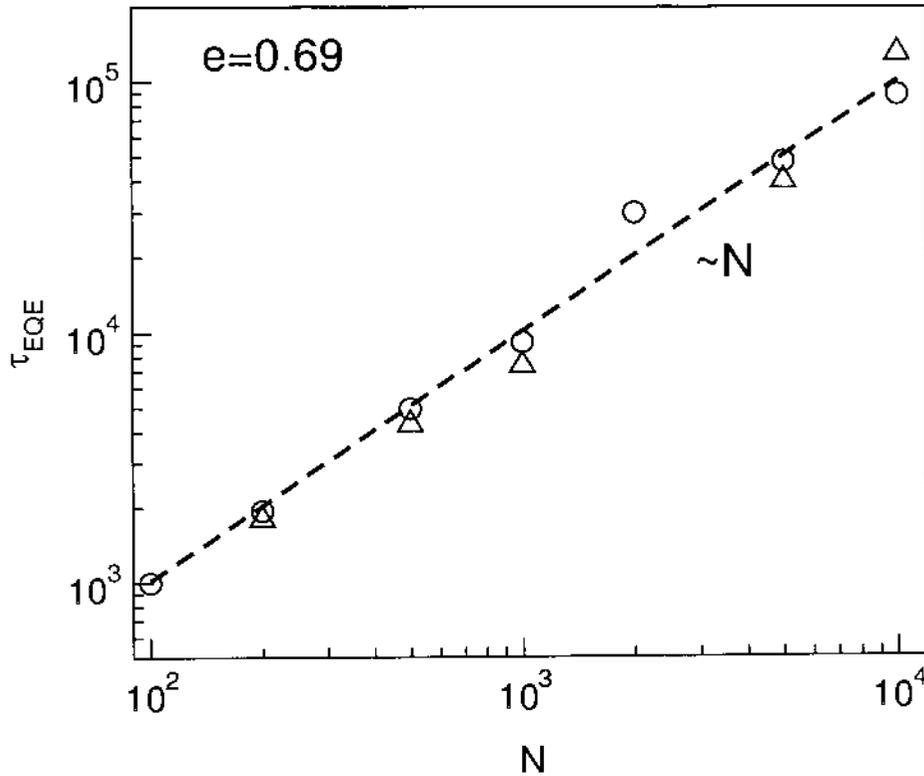


Figura 4.7: Representamos o tempo de vida do estado meta-estável quase-estacionário τ_{EQE} para o modelo HCM com $e = 0.69$ em função de N . Indicamos diferentes condições iniciais fora do equilíbrio com símbolos diferentes. As figuras mostram que a duração destes estados diverge quando N cresce.

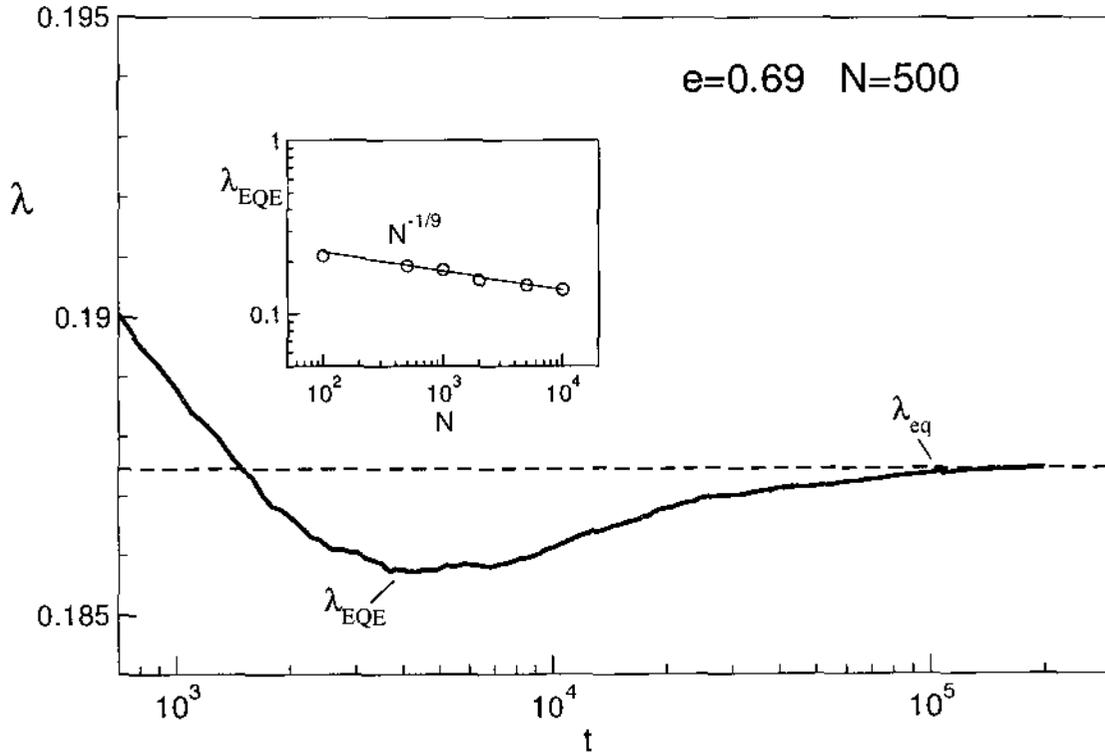


Figura 4.8: Representamos o coeficiente máximo de Lyapunov, λ , em função do tempo para o modelo HCM com $e = 0.69$ e $N = 500$. Também neste caso encontramos dois platôs. Na figura inserida mostramos que λ_{EQE} tende a zero com $N^{-1/9}$. Este comportamento pode ser explicado através das flutuações anômalas da magnetização. Veja o texto para mais detalhes.

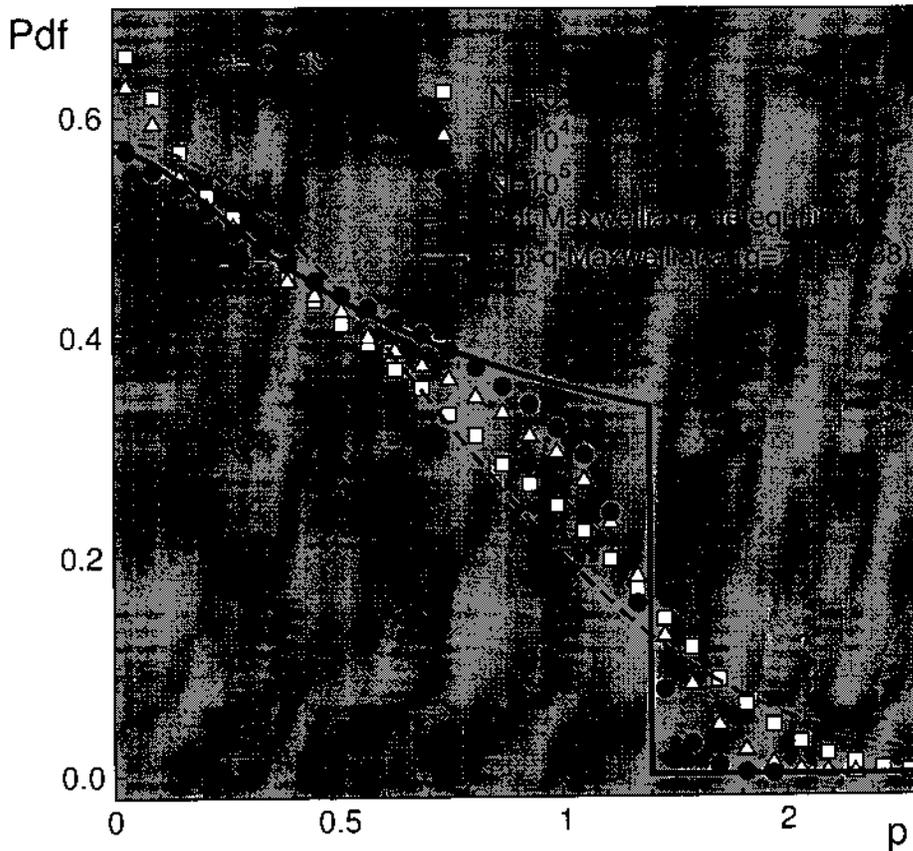


Figura 4.9: Representamos as distribuições de probabilidade da velocidade no modelo HCM para $e = 0.69$ e diversos valores de N (símbolos abertos). A forma da Maxwelliana de equilíbrio representada (curva tracejada) juntamente com um ajuste obtido usando o formalismo não-extensivo com $q = 7$ e $T = 0.38$ (curva contínua).

desprezível ao crescer de N , e isto implica que anomalias são esperadas também no processo de relaxação, como apontado por Krylov [124], e de uma maneira muito parecida no caso dos mapas discutidos nos capítulos precedentes.

O fenômeno do platô quase-estacionário pode ser analisado não somente através da temperatura, ou seja, do segundo momento, mas também dos outros momentos da distribuição de velocidades. Na Fig. 4.9 focalizamos a nossa atenção justamente sobre as distribuições de probabilidade das velocidades. A figura mostra que a distribuição de velocidades, inicialmente uniforme, rapidamente adquire e mantém, em toda a duração do

estado quase-estacionário, uma forma *não-Maxwelliana*. Em particular, a distribuição de velocidade é mais larga do que a Maxwelliana de equilíbrio (representada com uma linha tracejada) para pequenas velocidades, mas exibe um decréscimo mais rápido para $p > 1.2$. O aumento abrupto das probabilidades em torno de $p \sim 1$ é consistente com a presença de difusão anômala e de vôos de Lévy (com velocidade média $p \sim 1$) observados no regime quase-estacionário [104]. O sucessivo decréscimo rápido para $p > 1.2$ é devido à conservação da energia total. A estabilidade da distribuição de velocidade no estado quase-estacionário pode ser explicada pelo fato de que para $N \rightarrow \infty$ temos $m_{EQE} \rightarrow 0$, a força sobre cada spin também tende a zero ao crescer de N , sendo ela dada por

$$F_i = -m_x \sin \theta_i + m_y \cos \theta_i. \quad (4.28)$$

Se N é finito, existe somente uma pequena força aleatória, que faz com que o sistema evolua para a distribuição usual de Maxwell-Boltzmann depois de um tempo suficiente. Quando isto acontece, vôos de Lévy e difusão anômala desaparecem e o processo difusivo passa a ser Browniano [104], como mostrado em Fig.4.6. O formalismo não-extensivo consegue reproduzir a distribuição de probabilidade não-Maxwelliana exibida na Fig.4.9. Como vimos, o formalismo não-extensivo prevê, para o *ensemble* canônico, uma dependência q -exponencial nas variáveis p_i , θ_i . Esta distribuição deve ser integrada sobre todos os ângulos θ_i e todas menos uma velocidades p_i , para se obter a distribuição de probabilidade marginal de momento da única partícula (*single-particle marginal momentum distribution*), $P_q(p)$. É esta distribuição que deveria ser comparada com o resultado numérico, $P_{num}(p)$, obtido, dentro do esquema de dinâmica molecular que estamos tratando, considerando subsistemas de tamanho M crescente dentro de um sistema total de tamanho N também crescente. Em concordância com o limite numérico $N \gg M \gg 1$ a expectativa é de passar de evidências associadas ao *ensemble* microcanônico para resultados relacionados ao *ensemble* canônico (ou seja, o *cut-off* microcanônico deveria gradualmente desaparecer como acontece nos sistemas Hamiltonianos de curto alcance), justificando assim o confronto entre $P_q(p)$ e $P_{num}(p)$. A grande complexidade associada a este procedimento nos faz optar para um mais ingênuo, mas realizável, confronto com o resultado numérico. Com efeito,

consideramos um ajuste usando a seguinte distribuição para a partícula única

$$P(p) \propto \left[1 - (1 - q) \frac{p^2}{2T} \right]^{\frac{1}{(1-q)}}, \quad (4.29)$$

que reproduz a distribuição de Maxwell-Boltzmann para $q = 1$. O mesmo tipo de fórmula foi utilizado para descrever um fluxo turbulento de Couette-Taylor [12] e distribuições de probabilidades não-Maxwellianas associadas a difusão anômala de células *Hydra* em agregados celulares [84]. No caso do modelo HCM o melhor ajuste é obtido com uma curva com um parâmetro $q = 7$, e uma temperatura $T = 0.38$. O acordo entre resultado numérico e curva teórica melhora quando o tamanho do sistema cresce. Uma lei de escala confirmando a validade do ajuste é indicada na referência [59]. Uma vez que temos $q > 3$, a curva teórica não tem um integral finito e precisa então ser truncada com um *cut-off* abrupto para que a probabilidade total seja igual a 1. Devido às propriedades de renormalização do parâmetro q discutidas na seção 1.2.1, o valor de ajuste $q = 7$ pode representar um índice entrópico *efetivo*, de modo parecido com o que acontece na discussão da seção 3.2.5. De fato, na referência [63], a mesma análise foi realizada usando um *waterbag* inicial levemente diferente do anterior, que tem a propriedade de aproximar mais rapidamente o limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$. Neste caso obtemos a evolução dinâmica da distribuição de probabilidade das velocidades representada na Fig. 4.13. e o valor de ajuste para o parâmetro q vale $q \simeq 3.7$ (veja os detalhes na próxima seção).

Em [59] foi verificado, através do cálculo da dimensão fractal d_2 , que surge uma correlação dinâmica no espaço μ da partícula única antes da situação de equilíbrio que corresponde a uma distribuição quase-uniforme. Durante tempos intermediários, aparece uma estrutura filamentosa (uma característica parecida foi recentemente encontrada também em sistemas auto-gravitacionais [100]), que pode ser relacionados aos platôs observados em Fig.4.6. Lembrando que o espaço μ é o resultado de uma projeção de um número enorme de graus de liberdade do espaço Γ , a presença destas estruturas no espaço μ é um forte indício de uma ocupação dinâmica não trivial do próprio espaço Γ , durante o estado quase-estacionário.

Mais recentemente, uma outra aplicação do formalismo não-extensivo foi observada para

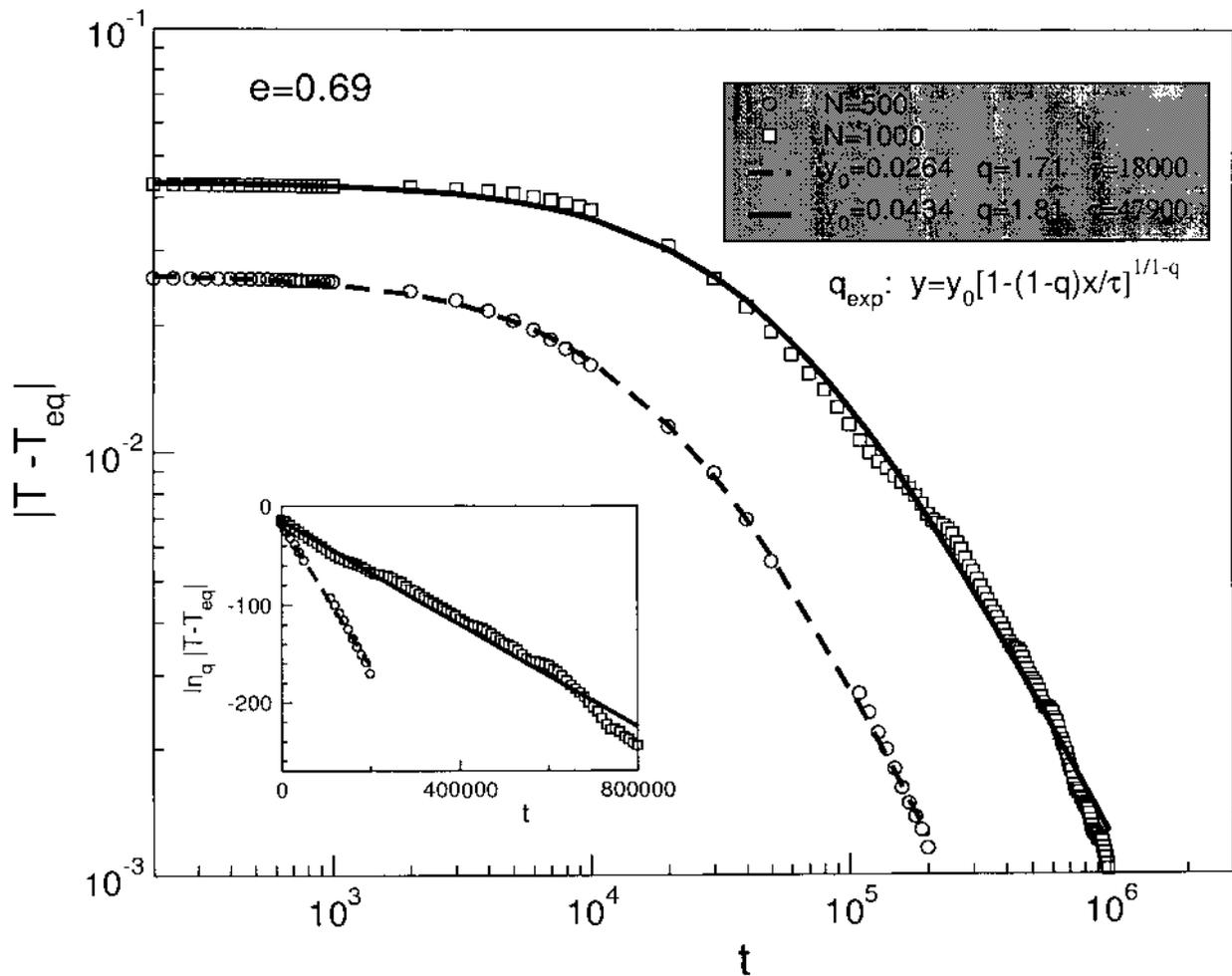


Figura 4.10: Representamos a diferença entre a temperatura T , deduzida do valor da energia cinética específica, e o valor da temperatura de equilíbrio T_{eq} , para o modelo HCM com $e = 0.69$ e $N = 500, 1000$, em função do tempo (símbolos abertos). Os pontos são o resultado de uma média para 1000 realizações diferentes. A figura mostra que o processo de relaxação é uma lei de potência em função do tempo e pode ser reproduzida muito bem por uma função q -exponencial decrescente, como mostram os ajustes q -exponenciais (linhas contínua e tracejada). Na figura inserida representamos o q -logaritmo dos mesmos dados. O parâmetro q relacionado à relaxação é diferente daquele obtido pelas distribuições de velocidades.

este modelo no regime de relaxação. Com efeito, foi encontrado que a relaxação temporal de quantidades macroscópicas, como por exemplo o valor da energia cinética específica, satisfaz leis de potência, e mais especificamente curvas q -exponenciais. Para ilustrar este fenômeno, em Fig.4.10, representamos o tempo de relaxação da temperatura para o seu valor final, para $e = 0.69$ e dois tamanhos $N = 500, 1000$. Em particular, mostramos a quantidade

$$y(t) = |T(t) - T_{eq}|, \quad (4.30)$$

com $T_{eq} = 0.476$. O sistema relaxa para o equilíbrio em concordância com a fórmula q -exponencial¹

$$y(t) = y_0 \left[1 - (1 - q) \frac{t}{\tau} \right]^{\frac{1}{(1-q)}}, \quad (4.31)$$

onde τ é um tempo característico e y_0 um valor de saturação. Para $N = 500$ são utilizados os mesmos dados mostrados na Fig. 4.6. Para este tamanho específico, encontra-se um valor do parâmetro q igual a 1.71 e um tempo característico de relaxação $\tau = 18000$. Um valor levemente maior de q , igual a 1.81, é encontrado para $N = 1000$. Na figura inserida exibimos o q -logaritmo dos mesmos dados. Não existem razões claras para que o parâmetro q encontrado aqui para a relaxação seja ligado de forma simples com aquele encontrado para as distribuições de velocidade. É interessante notar que processos de relaxação similares, caracterizados por q -exponenciais, foram encontrados em experimentos de eco em Internet [125].

A riqueza da física associada a estes platôs meta-estáveis tem ainda outros aspectos. Na referência [110] foi encontrado que o modelo HCM exhibe envelhecimento (*aging*) em correspondência dos estados meta-estáveis quase-estacionários. É portanto interessante o estudo de possíveis conexões entre vidros de spin, sistema HCM e estatística não-extensiva. Um primeiro passo relevante nesta direção foi dado em [112], onde foi introduzida a polarização dos spins como novo parâmetro de ordem. Apesar da ausência de desordem ou frustração no termo de interação do modelo HCM, o valor do parâmetro de polarização

¹O sinal negativo na frente do termo $(1 - q)$ é devido ao fato que estamos considerando um decaimento q -exponencial e $q > 1$.

durante os estados quase-estacionários permite de interpretar este regime como uma *fase de vidro de spin* de origem dinâmica.

É bom também ressaltar que as anomalias aqui descritas não são uma característica peculiar do modelo HCM. Com efeito, o mesmo comportamento foi encontrado numa generalização deste modelo, o chamado modelo $\alpha - XY$ [106, 107, 108], onde os spins são colocados num retículo d -dimensional e a energia de interação entre dois spins genéricos i e j (na formula (4.21)) é modulada por um fator extra $1/r_{ij}^\alpha$. Aqui r_{ij} indica a distância entre o spin i e o spin j [108]. Se $\alpha/d < 1$ a não-aditividade induz anomalias similares aquelas descritas para o modelo HCM. De outro lado, se $\alpha/d > 1$, ou seja, quando o potencial decresce com suficiente rapidez em função de r , o modelo $\alpha - XY$ se comporta de maneira padrão e não exibe nenhuma das anomalias discutidas nesta seção. Características parecidas, induzidas pela não-aditividade, foram também encontradas para potenciais de longo alcance do tipo Lennard-Jones [126].

4.2.2 Princípio zero da termodinâmica nos platôs quase-estacionários

O princípio zero da termodinâmica — se os sistemas A e B são em equilíbrio térmico com C , estarão também em equilíbrio térmico entre si — é um dos princípios básicos em física. Este princípio estabelece a transitividade da temperatura e é essencial na formulação lógica da termodinâmica. Em particular, é fundamental para a termometria, disciplina básica na física experimental. Para se tentar uma abordagem generalizada para a descrição estatística dos platôs quase-estacionários descritos na seção anterior, uma das primeiras questões a ser analisada é justamente a validade do princípio zero em correspondência destes estados. Usando a definição *dinâmica* padrão de temperatura, que já usamos várias vezes durante esta tese, nesta seção mostramos que o princípio zero da termodinâmica se aplica aos estados quase-estacionários de maneira essencialmente igual ao caso do equilíbrio térmico convencional. Além disso, mostramos que o processo de termalização acontece também em relação a um termômetro que, diferentemente do ‘banho térmico’ que vem sendo testado, é

caracterizado por interações de *curto alcance*. Uma vez que estes platôs apresentam várias evidências de conexões com a mecânica estatística não-extensiva, este resultado sugere que estes conceitos básicos se aplicam também em situações que o formalismo não-extensivo pretende descrever.

Consistentemente com a mecânica estatística usual de equilíbrio, definimos a 'temperatura dinâmica' T como

$$T(t) \equiv \frac{2K(t)}{N}, \quad (4.32)$$

onde K é a energia cinética e t é o tempo. Aqui também estamos usando a qualificação *dinâmica* no sentido que esta definição provém puramente da dinâmica e não de um contato térmico com um termóstato. Resumimos as características principais dos estados quase-estacionários do modelo HCM (4.21). Para determinadas classes de condições iniciais, a temperatura T evolui para um primeiro platô caracterizado por um valor T_{EQE} abaixo da temperatura de equilíbrio de BG T_{BG} , antes de relaxar para um segundo platô que coincide com T_{BG} . A diferença entre T_{EQE} e T_{BG} é máxima próxima de $e = 0.69$. Para esta energia específica a solução analítica de BG fornece $T_{BG} = 0.476$. Por outro lado, T_{EQE} depende do tamanho N do sistema, mas tende para um bem definido valor $T_\infty \simeq 0.38$ quando $N \rightarrow \infty$. Além disto, como vimos, este estado quase-estacionário apresenta envelhecimento e distribuições de velocidades da partícula única não-Maxwellianas. Como evidenciam claramente os resultados numéricos, no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, o estado quase-estacionário dura para sempre. Se temos a intenção de tentar uma descrição termodinâmica deste estado, necessitamos discutir o princípio zero nestas condições. Gostaríamos também analisar a resposta de um termômetro que teste a temperatura quase-estacionária.

Para responder a estas perguntas integramos numericamente as equações de Hamilton usando o integrador simplético da quarta ordem de Neri-Yoshida [95] com uma conservação da energia $\Delta E_N/E \simeq 10^{-4}$, usando diferentes configurações.

Na nossa primeira simulação examinamos precisamente a construção dos livros de texto para derivar o *ensemble* canônico como subsistema do *ensemble* microcanônico.

Consideramos primeiro o sistema Hamiltoniano isolado (4.21), composto de N spins.

Com os dados iniciais definimos todos os ângulos paralelos (magnetização inicial 1), por exemplo $\theta_i = 0, \forall i = 1, 2, \dots, N$, e os momentos angulares distribuídos dentro de um intervalo em torno da origem “*quase uniformemente*”, ou seja com uma separação fixa a entre eles, mas cada um com um pequeno deslocamento aleatório que pode ser no máximo igual a a . Renormalizamos depois a distribuição para se obter uma energia total específica $e = 0.69$ e momento angular total igual a zero:

$$\sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} = 0.69N \quad e \quad \sum_{i=1}^N p_i = 0 \quad (4.33)$$

respectivamente. Estas condições iniciais para o momento angular são muito parecidas aquelas consideradas anteriormente e mais usadas na literatura (dados iniciais do tipo *waterbag*), mas, pelo mesmo N , a evolução dinâmica desta configuração inicial leva a um valor mais baixo de T_{EQE} (de pouco acima de T_∞), e produz também flutuações menores e uma duração maior do platô anômalo.

Em seguida, consideramos dois diferentes subsistemas do sistema isolado, cada um formado por M spins, com $M \ll N$. O primeiro (segundo) subsistema é composto pelos dados iniciais mais (menos) energéticos, de modo que a própria temperatura inicial

$$T_M(0) \equiv \frac{2K_M(0)}{M} \quad (4.34)$$

é maior (menor) da temperatura inicial do sistema isolado completo

$$T_N(0) \equiv \frac{2K_N(0)}{N}. \quad (4.35)$$

Chamaremos estas duas configurações iniciais respectivamente configuração de *subsistema quente* e configuração de *subsistema frio*. Realizaremos estas configurações para vários valores de M , para poder estudar os efeitos de tamanho finito.

A Fig. 4.11 mostra o resultado de uma *única* típica simulação, com $N = 5 \times 10^3$, $M = 5 \times 10^2$ e 1×10^2 . Em todos os casos analisados notamos que T_M relaxa depois de um certo tempo para T_N , *enquanto o sistema isolado ainda está no estado quase-estacionário*. Esta situação dura até que todos os sistemas passam pela esperada relaxação para T_{BC} , devida a efeitos de tamanho finito. É importante observar que os subsistemas

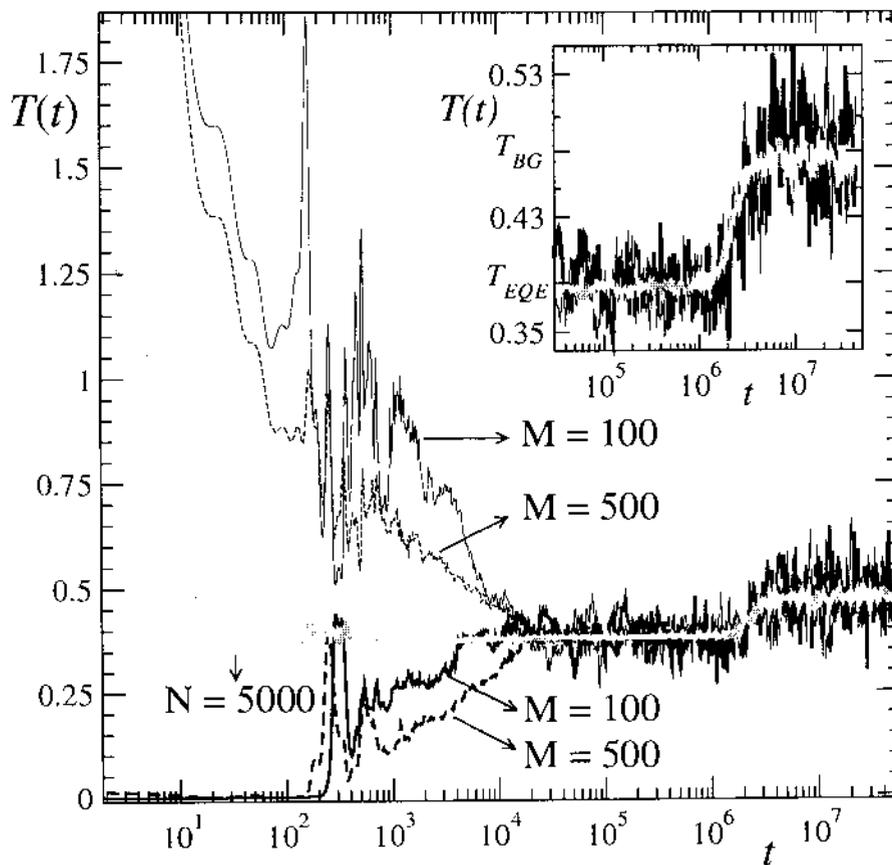


Figura 4.11: Evolução da temperatura para um sistema HCM Eq. (4.21) isolado, com $N = 5000$ na linha cinza. Os subsistemas *quente* (que começa na parte superior da figura) e *frio* (que começa na parte inferior da figura) são indicados, com $M = 100$ e 500 . Na figura inserida: amplificação da região de *crossover* entre T_{EQE} e T_{BG} .

que começam com a temperatura mais alta, durante a relaxação inicial para a temperatura do sistema isolado, passam para o valor T_{BG} sem sinais de relaxação para a própria T_{BG} . Este resultado, para o estado quase-estacionário, confirma a validade do princípio zero da termodinâmica. De fato, dois sistemas estão em (meta)equilíbrio térmico com um terceiro sistema, e em (meta)equilíbrio térmico entre eles. Esta confirmação abre a possibilidade para um tratamento de *ensemble* canônico do estado quase-estacionário, generalizando o caminho seguido na seção 4.1, já que todos os subsistemas com $M \ll N$ compartilham a mesma energia cinética específica depois de um transiente inicial. Apresentamos resultados preliminares deste estudo em andamento [42] na próxima seção.

Na segunda configuração desta seção vamos abordar o problema da mensurabilidade da temperatura dinâmica associada ao estado quase-estacionário. Fazemos isto considerando o sistema HCM (4.21) como um *termóstato* e construindo um *termômetro* bastante diferente do modelo HCM, no sentido que satisfaz as hipótese usuais de BG. Mais precisamente, a diferença consiste no fato que escolhemos interações de *curto alcance* para o termômetro, seja pela sua própria dinâmica, seja pelo acoplamento com o termóstato. O termômetro é então composto por M spins clássicos cuja Hamiltoniana é

$$H_{\text{termômetro}} = \sum_{j=1}^M \frac{p_j^2}{2} + \sum_{j=1}^M [1 - \cos(\theta_{j+1} - \theta_j)]. \quad (4.36)$$

O potencial é o mesmo do termóstato mas conecta só primeiros vizinhos. Como vimos na seção 4.1, esta interação de curto alcance resulta num sistema tradicional de BG. O termômetro é preparado desta maneira: antes de entrar em contato com o termóstato ele evolui livremente para o tempo necessário para relaxar a uma temperatura de equilíbrio (caracterizada por uma distribuição de velocidade Maxwelliana da partícula única) diferente daquela do termóstato. As $2M$ coordenadas definidas por esta evolução dinâmica são usadas em seguida como dados iniciais para a sucessiva evolução em contato com o termóstato. Desta maneira, estamos preparando o termômetro num estado de equilíbrio de BG.

Do outro lado, preparamos o termóstato com os dados iniciais descritos anteriormente e deixamos que evolua separadamente até que o transiente inicial esteja acabado e o

termóstato tenha alcançado o estado quase-estacionário. Em um tempo conveniente $t_{contato}$, colocamos os dois sistemas em contato dinâmico através deste termo de interação:

$$H_{int} = c \sum_{j=1}^M [1 - \cos(\theta_j - \theta_{\xi(j)})], \quad (4.37)$$

onde $\xi(i)$ é aqui um número natural aleatório entre 1 e N (que permanece fixo por toda a sucessiva evolução dinâmica) que determina o termo de conexão entre os spins do termômetro e do termóstato. Incluímos também uma constante de acoplamento c para regular a intensidade do termo de interação (a constante de acoplamento entre spins do mesmo sistema é igual a 1). Se chamamos $H_{termóstato}$ a Hamiltoniana (4.21), o sistema total depois de $t_{contato}$ é descrito então pela Hamiltoniana

$$H = H_{termóstato} + H_{termômetro} + H_{int}. \quad (4.38)$$

Resultados de uma *única* simulação típica com $N = 10^5$, $M = 50$ e $c = 5 \times 10^{-2}$ são mostrado em Fig. 4.12. É importante escolher apropriadamente a ordem de grandeza do valor da constante de acoplamento c . De fato, de um lado queremos estabelecer um contato significativo entre os sistemas, mas do outro não queremos produzir uma perturbação muito grande do termóstato. Esperamos que este cuidado seja menos importante na medida em que se consiga aproximar numericamente o limite $(N, M, N/M) \rightarrow (\infty, \infty, \infty)$. Na figura note que a temperatura do termômetro

$$T_M \equiv \frac{2K_{termômetro}}{M}, \quad (4.39)$$

escolhida para estar inicialmente abaixo da temperatura do termóstato, fica somente por alguns passos temporais depois de $t_{contato}$ no valor do seu equilíbrio inicial, e depois cresce rapidamente para alcançar a temperatura do termóstato

$$T_N = 2K_{termóstato}/N. \quad (4.40)$$

A relaxação acontece *completamente durante o estado quase-estacionário*, para um intervalo de tempo $\Delta t \approx 10^5$ passos temporais (obviamente são presentes flutuações devidas

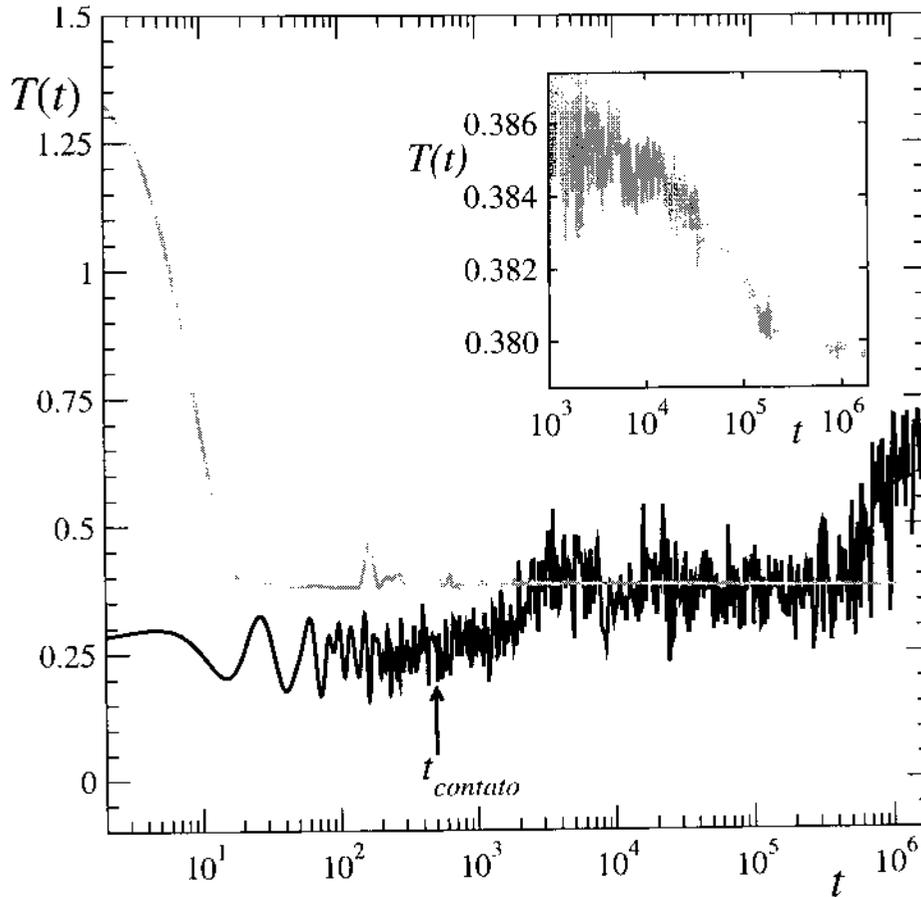


Figura 4.12: Evolução da temperatura de um termóstato de N -spins (Eq. (4.21)) na linha cinza, e de um termômetro de M -spins (Eq. (4.36)) na linha preta. Nesta figura $N = 10^5$ e $M = 50$. Depois de $t_{contato}$ os sistemas interagem através H_{int} (4.37). Na figura inserida: amplificação do mínimo da temperatura do termóstato (veja o texto para detalhes).

aos efeitos de tamanho finito). Diferentemente do caso anterior, o termômetro finalmente começa a relaxar para a temperatura de equilíbrio *antes* que o termóstato comece a sua termalização final. Como explicamos mais abaixo, consideramos este como mais um efeito de tamanho finito. Note na figura inserida que o tempo em que o termômetro deixa a temperatura do termóstato coincide aproximadamente com o seu mínimo, que se sabe estar presente logo antes da relaxação final do termóstato para T_{BG} [59].

Quando o termômetro é preparado de modo a ter, antes do contato, uma temperatura maior daquela do termóstato, os nossos resultados não mostram claramente sinais de termalização. T_M tipicamente cresce até que alcança T_{BG} . Possivelmente este comportamento desapareça quando simulações com sistemas ainda maiores sejam realizáveis. É também interessante notar que, mesmo preparando o termômetro com temperaturas iniciais abaixo de $T_\infty = 0.38$, a termalização acontece somente para N e N/M suficientemente grande. Por exemplo, simulações com $N = 5 \times 10^5$ e $M = 5 \times 10^2$ não exibem processos de termalização.

Juntando todos estes fatos, precisamente a temperatura do termômetro que alcança T_{BG} antes do termóstato, a ausência de relaxação para $T_M(t_{contato}) > T_N(t_{contato})$, a ausência de relaxação para sistemas com N e N/M pequenos; e também considerando o fato que o sistema no estado quase-estacionário envelhece [110], podemos apontar para a seguinte conjectura. O modelo HCM (4.21) se comporta, durante o estado quase-estacionário, como tendo algum mecanismo dinâmico interno que, depois de um certo tempo (para N finito), guia o sistema fora do estado quase-estacionário para o equilíbrio de BG. Este mecanismo atua como um relógio interno que regula este tempo de termalização, e pode funcionar de uma forma parecida a um poço de potencial cuja profundidade decresce no tempo. Um sistema com flutuações suficientemente grandes, comparadas com a profundidade do poço, não estará nunca confinado pelas paredes do potencial. Por outro lado, um sistema com flutuações suficientemente pequenas é forçado a permanecer dentro do poço, mas somente para um tempo limitado, até que a profundidade do poço seja comparável com as flutuações. No nosso caso, o efeito do poço de potencial seria aquele de impor ao sistema a visita de somente uma parte limitada do espaço de fases. Enquanto o fato do sistema estar fora do poço durante um tempo suficientemente grande seria associado a uma ocupação uniforme

do espaço de fases, o sistema é portanto ergódico e relaxa para a esperada temperatura de BG. Esta conjectura apresenta obviamente analogias com o estudo dos mapas simpléticos apresentado no capítulo 3. Em concordância com esta conjectura as flutuações influenciam muito a permanência do sistema no estado quase-estacionário e a própria mensurabilidade da temperatura T_{EQE} . Note-se que este cenário é também consistente com o processo de relaxação de subsistemas de um sistema isolado observado na Fig. 4.11.

Em relação ao princípio zero da termodinâmica para os estados quase-estacionários e também da abordagem de ensemble canônico discutida na próxima seção, apresentamos também uma análise de como a distribuição de probabilidade dos momentos dos subconjuntos M evolui no tempo [63]. Os resultados são representados na Fig. 4.13. Observamos que a distribuição de probabilidade para o subconjunto “quente” (que de uma certa forma é o mais “fora do equilíbrio”) depois de um transiente da ordem $t \sim 10^3$ coincide com a distribuição de probabilidade para o sistema total de N -spins. Depois deste transiente, a distribuição de probabilidade para o subconjunto M estabiliza-se numa distribuição não-Maxwelliana que permanece até o tempo de *crossover* $t_c \sim 10^6$. Durante toda esta fase meta-estável, a distribuição de probabilidade é bem ajustada por uma q -Maxwelliana com um cut-off, com uma $T = T_{EQE}$ e $q \simeq 3.7$. O valor de q que encontramos aqui é diferente daquele calculado em [59] e apresentado na seção anterior. Isto pode ser uma consequência do fato que estamos utilizando condições iniciais levemente diferentes (mais ordenadas), e/ou a efeitos de tamanho finito. Uma possível conjectura é que não somente o valor de q pode mudar quando o limite termodinâmico é aproximado corretamente (primeiro $N \rightarrow \infty$, depois $M \rightarrow \infty$, e finalmente $t \rightarrow \infty$), mas também a localização do *cut-off* (dos momentos) pode se mover para o infinito. Depois do *crossover* a distribuição de probabilidade deixa de ser anômala e relaxa para a quase-Maxwelliana de equilíbrio com $T = T_{BG}$ (estritamente Maxwelliana, sem *cut-off*, somente para $N \rightarrow \infty$).

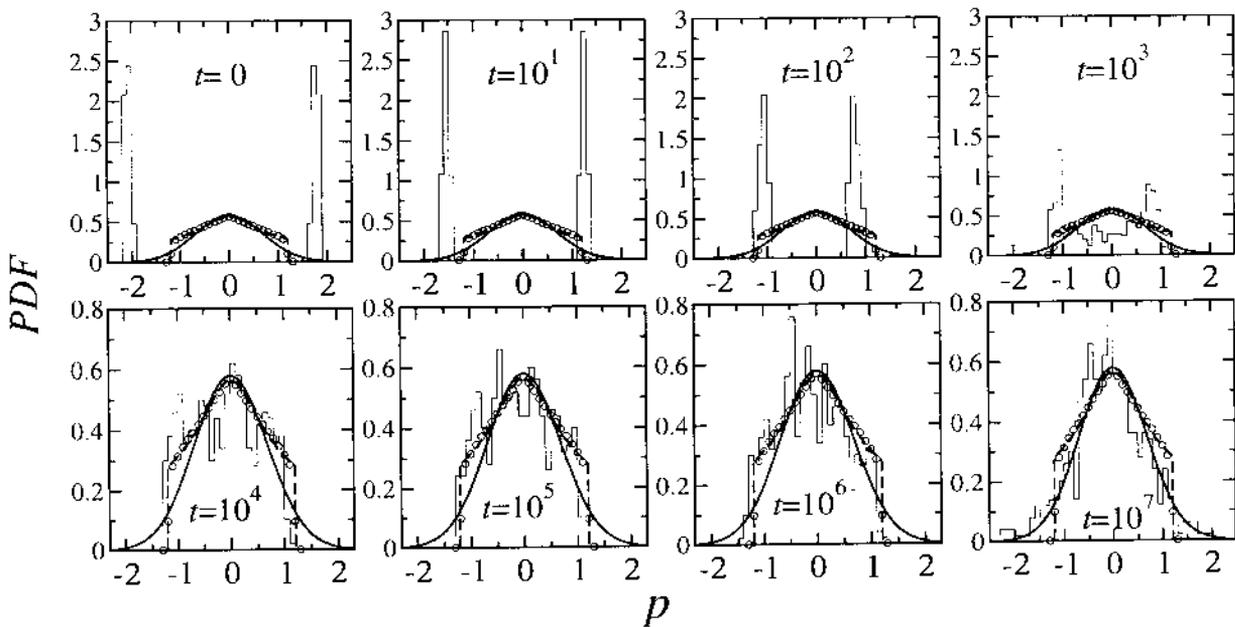


Figura 4.13: “Instantâneas” da evolução temporal da distribuição de probabilidade dos momentos de um subconjunto “quente” no espaço μ . O histograma a escada mostra a distribuição de probabilidade instantânea nos tempos $t = 0$ e $t = 10^k$ (com $k = 1, 2, \dots, 7$), para $M = 500$ spins dentro de um sistema total de $N = 5000$ spins. Os círculos vazios mostram a média sobre 10^3 realizações para $N = 10^5$ spins (médias realizadas durante platô quase-estacionário). A linha tracejada representa o ajuste q -exponencial com $T = T_{EQE} = 0.38$ e $q = 3.7$. Finalmente, a curva contínua mostra a distribuição de probabilidade Maxwelliana de equilíbrio. Estas últimas três curvas são iguais em todas as figuras e são exibidas para ter uma referência.

4.2.3 Derivação dinâmica de ensemble canônico para o modelo Hamiltoniano de campo médio

Nesta seção aplicamos o esquema de cálculo apresentado na seção 4.1 ao modelo HCM, o qual, lembramos, tem uma interação de alcance infinito entre os rotores:

$$H_N = K_N + V_N = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^N [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)], \quad (4.41)$$

com $\theta_i \in [0, 2\pi)$ e $p_i \in \mathbb{R}$. Para determinar a evolução dinâmica do sistema, utilizamos um integrador simplético [95] baseado nesta Hamiltoniana. Definimos, como na seção 4.1, o sistema canônico como composto por um subconjunto de M rotores, com $1 \ll M \ll N$. A generalização para o caso de alcance infinito do esquema de cálculo apresentado na seção 4.1 apresenta várias sutilezas, algumas delas ainda objeto de estudo. A primeira destas sutilezas é que agora a energia de interação entre o sistema canônico e o resto do sistema isolado resulta ser *muito maior* de E_M , já que cada rotor do subconjunto canônico está em contato com $M - 1$ outros rotores “canônicos” e com $N - M$ rotores do “banho térmico”. Mesmo assim, tentamos avançar na nossa análise para verificar se conseguimos, pelo menos no caso do equilíbrio utilizando o formalismo de BG, deduzir uma distribuição de probabilidades pela energia do sistema canônico $p(E)$ que possa ser comparada com os resultados dinâmicos obtidos integrando as equações de Hamilton,

Para poder utilizar a solução canônica analítica de BG para este modelo (veja a apêndice A.2), temos que definir a seguinte Hamiltoniana *efetiva* para o subconjunto canônico

$$H_M = K_M + V_M = \sum_{i=1}^M \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2M} \sum_{i,j=1}^M [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)]. \quad (4.42)$$

Trata-se de uma Hamiltoniana efetiva porque, para obter uma Hamiltoniana invariante em forma em relação a H_N , dividimos por M a constante de acoplamento no potencial. De fato, na simulação dinâmica a força que realmente atua em cada rotor por causa da interação com um outro elemento do sistema é mediada pelo fator $1/N$ em lugar de $1/M$, já que as equações dinâmicas são deduzidas da Hamiltoniana H_N .

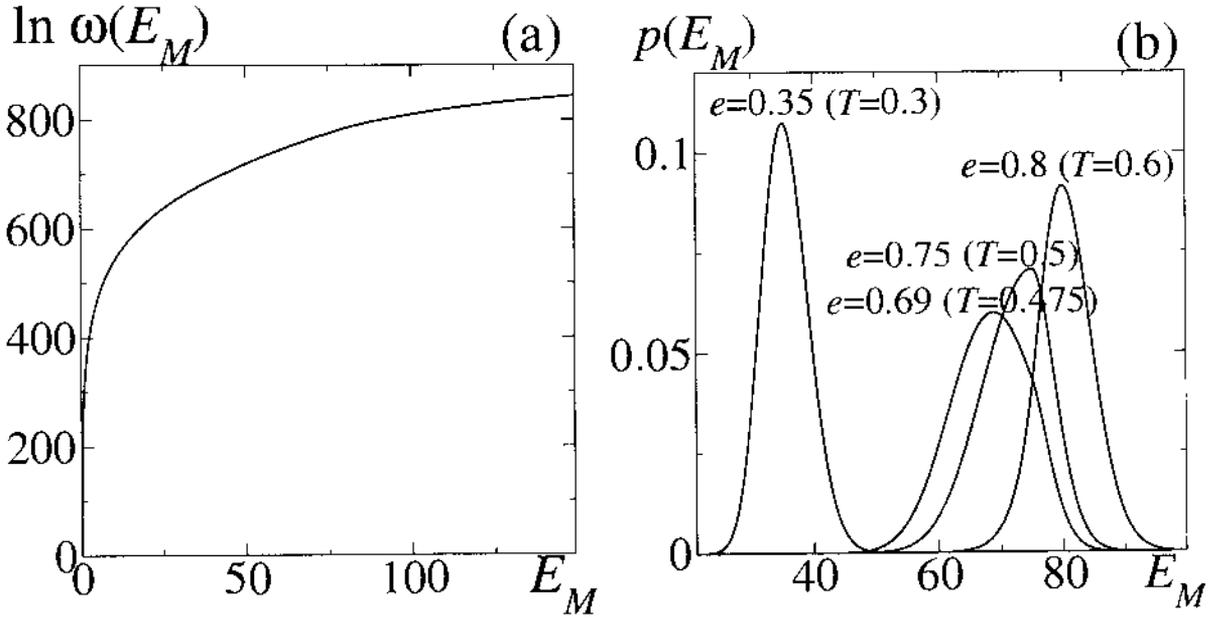


Figura 4.14: Predição analítica canônica de BG para o modelo HCM com $M = 100$. (a) Gráfico log-linear da densidade de estados $\omega_M(E_M)$. (b) $p(E_M) \equiv \omega_M(E_M) \exp(-E_M/T)/Z$ para diferentes temperaturas.

Consistentemente com esta escolha, para calcular dinamicamente o valor da energia canônica E_M na base dos valores das coordenadas $(\theta_i(t), p_i(t))_{i=1,2,\dots,M}$, usamos a forma funcional H_M Eq. (4.42). Verificamos de fato que calculando E_M através desta Hamiltoniana efetiva, obtemos que a energia específica média do subconjunto canônico coincide com a energia específica do sistema isolado, ou seja,

$$\frac{\bar{E}_M}{M} \equiv \frac{1}{Mt} \int_0^t dt' H_M(t') = \frac{E_N}{N}. \quad (4.43)$$

O uso desta Hamiltoniana efetiva poderia ser evitado se, desde o começo, a Hamiltoniana H_N fosse definida na sua forma natural não-extensiva em lugar que através da prescrição de Kac [106]. Esta possibilidade está sendo estudada [42].

O cálculo da função canônica, definida usando a Hamiltoniana efetiva H_M

$$Z_M = \int \prod_{i=1}^M (dp_i dq_i) \exp[-\beta H_M(p_i, q_i)], \quad (4.44)$$

produz, para este modelo, a energia livre específica

$$f \equiv - \lim_{M \rightarrow \infty} \left[\frac{\ln Z_M}{M\beta} \right] \quad (4.45)$$

(veja a apêndice A.2)

$$f = \frac{1}{2} - \frac{1}{\beta} \left\{ \frac{1}{2} \ln \left(\frac{2\pi}{\beta} \right) - \max_w \left[\frac{w^2}{2\beta} - \ln(2\pi I_0(w)) \right] \right\}, \quad (4.46)$$

com a condição de máximo que implica em esta equação de consistência:

$$\frac{w}{\beta} = \frac{I_1(w)}{I_0(w)}, \quad (4.47)$$

onde I_0 é a função modificada de Bessel da primeira espécie da ordem 1. Se obtém então a curva calórica de equilíbrio representada nas Figs. 4.5 ou A.2, caracterizada por uma transição de fases da segunda ordem na energia específica $e = E_M/M = 0.75$ ($T = 0.5$). Logo, podemos deduzir a densidade de estados através da fórmula

$$\frac{\omega(E_M)}{\omega(E_0)} = \exp \left[\int_{E_0}^{E_M} dE' \beta(E') \right], \quad (4.48)$$

onde E_0 é a energia do estado fundamental. O resultado deste cálculo é mostrado em Fig. 4.14(a) para $M = 100$. A Fig. 4.14(b) exibe a predição de *ensemble* canônico de BG para $p(E_M)$, obtida multiplicando a densidade de estados pelo fator de Boltzmann, para diferentes valores da temperatura T (ou da energia específica e). Note-se que a presença do ponto crítico altera, nas suas vizinhanças, o usual aumento do segundo momento da distribuição ao crescer da energia.

Para determinar do ponto de vista dinâmico a distribuição de probabilidades da energia total do sistema canônico, adotamos como primeira abordagem uma definição mista entre médias temporais e médias de *ensemble*, $p^{t,e}(E_M)$ (veja Eq. (4.3)), usando um tempo total de observação $\tau = 10^3$ e um número total de realizações $n = 10^4$. Os resultados, para as configurações $(N, M) = (10^3, 10^2)$ (círculos) e $(N, M) = (10^4, 10^2)$ (cruzes) e diferentes valores da energia E_N , são representados em Fig. 4.15. Para esta figura, usamos como dados iniciais uma distribuição Maxwelliana das velocidades p_i com uma variância definida em concordância com o valor da temperatura e uma distribuição uniforme para os

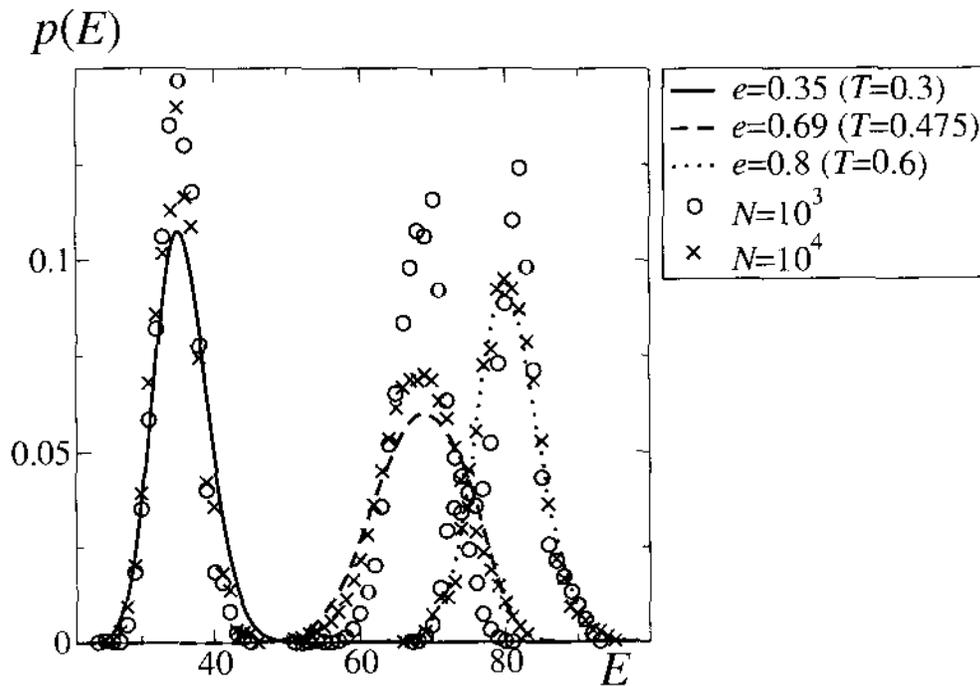


Figura 4.15: Comparação entre a predição de BG $p(E_M)$ (linhas contínuas) para estados de equilíbrio do modelo HCM e a média dinâmica $p^{t,e}(E_M)$ (cruzes e círculos) com um tempo total de observação $\tau = 10^3$ e um número de realizações $n = 10^4$, para diferentes energias específicas médias (temperaturas). Círculos: configuração $(N, M) = (10^3, 10^2)$. Cruzes: configuração $(N, M) = (10^4, 10^2)$.

ângulos θ_i . A diferença entre os resultados relativos a estas duas configurações é facilmente entendida em termos de efeitos de tamanho N finito. Com efeito, para o caso $N \sim M$ a energia do subconjunto M não pode flutuar (configuração microcanônica) e portanto a distribuição de energia é um pico em torno do valor fixo E_N . Do outro lado, para $N \gg M$ este pico relaxa na distribuição de equilíbrio obtida no limite termodinâmico. É exatamente este o efeito observado em Fig. 4.15. Notamos que estes resultados, mesmo não tendo o nível dos análogos resultados da seção 4.1, representam uma confirmação qualitativa das predições do formalismo canônico de BG para os estados de equilíbrio do modelo HCM. Isto, mesmo se a *energia de interação entre o sistema canônico e o resto do sistema isolado resulta ser muito maior de E_M* , e mesmo tendo usado a Hamiltoniana efetiva 4.42 para calcular a distribuição de probabilidade a partir das coordenadas dinâmicas. Este resultado é também consistente com a observada distribuição marginal de velocidades no espaço μ da partícula única, que é Maxwelliana.

Passamos agora a estudar o estado quase-estacionário para $e = 0.69$. Neste caso temos duas possíveis escolhas para a curva calórica que utilizamos para calcular a densidade de estados $\omega(E_M)$. No primeiro caso podemos considerar a curva de equilíbrio que deriva da solução analítica de *ensemble* canônico de BG e que coincide também com os resultados de dinâmica molecular se os dados iniciais são suficientemente próximos ao equilíbrio. No segundo, podemos usar a curva calórica representada em círculos na Fig. 4.5, que corresponde aos valores de duas vezes a energia cinética específica observados numericamente quando se consideram dados iniciais do tipo *waterbag* com magnetização 1. Note-se que esta curva tem uma região de calor específico negativo. Em ambos os casos temos que multiplicar a densidades de estados assim obtida pelo fator de Boltzmann com a temperatura $T_{EQE} = 0.38$, consistentemente com o valor observado da energia cinética específica durante o estado quase-estacionário. O resultado destas duas abordagens é apresentado em Fig. 4.16 (linhas sem símbolos), junto com os resultados dinâmicos nas mesmas configurações anteriores (linhas com símbolos), só que agora são considerados dados iniciais fora do equilíbrio. Neste caso, ambas as possibilidades teóricas não conseguem ter um acordo nem sequer qualitativo com os dados obtidos dinamicamente. A primeira escolha

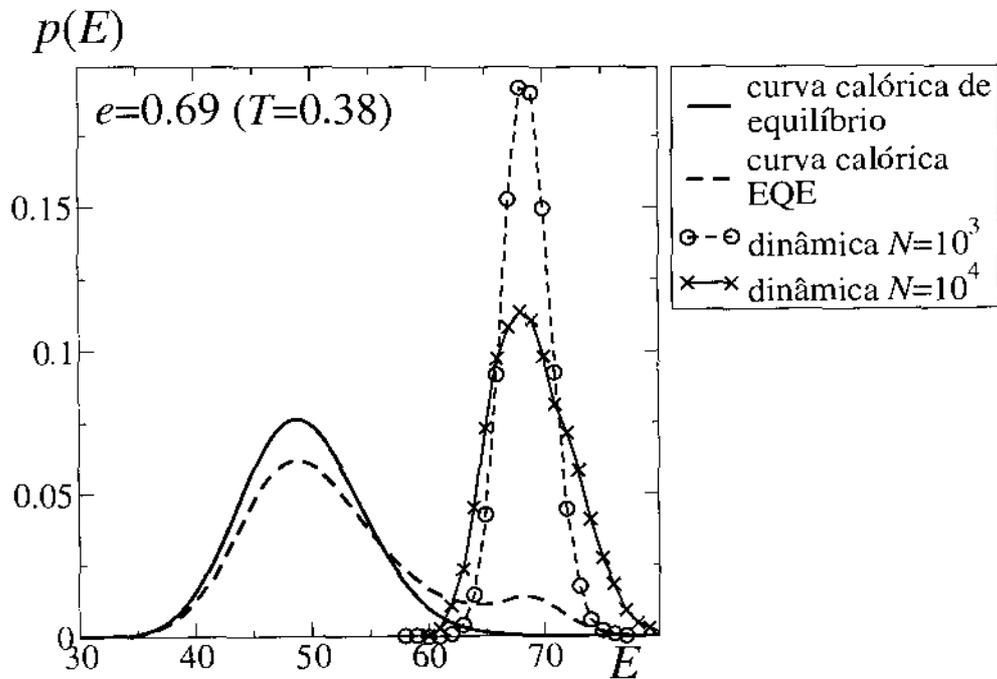


Figura 4.16: Comparação entre a predição de BG $p(E_M)$ (linhas contínuas sem símbolos) para do modelo HCM para $e = 0.69$ ($T_{EQE} = 0.38$) e a média dinâmica $p^{t,e}(E_M)$ obtida em correspondência do estado quase-estacionário com um tempo total de observação $\tau = 10^3$ e um número de realizações $n = 10^4$. Círculos: configuração $(N, M) = (10^3, 10^2)$. Cruzes: configuração $(N, M) = (10^4, 10^2)$.

teórica (linha contínua) mostra o pico da distribuição de equilíbrio para a temperatura $T = 0.38$, que é posicionado pouco antes da energia específica $e = 0.5$. A segunda escolha (linha tracejada), além deste pico maior mostra o surgimento de um segundo, pequeno pico em correspondência do valor $e \simeq 0.69$. Do outro lado, as curvas obtidas dinamicamente exibem, para ambas as configurações $(N, M) = (10^3, 10^2)$ (linha tracejada com círculos) e $(N, M) = (10^4, 10^2)$ (linha contínua com cruces), um único pico em torno do valor de energia específica $e \simeq 0.69$. Novamente, a observação desta discrepância entre resultados dinâmicos e predições do formalismo de BG é consistente com a observada distribuição marginal de velocidades no espaço μ da partícula única, que neste caso *não é* Maxwelliana.

Na parte final desta seção tentamos conjecturar sobre qual pode ser a razão pela qual o formalismo de BG neste caso não prediz o resultado observado dinamicamente. Mesmo não tendo resultados claro para apresentar a este respeito, esta reflexão nos ajuda a imaginar um possível experimento que possa esclarecer a origem destes estados anômalos. A derivação teórica que apresentamos aqui e na seção 4.16 é baseada em dois “pilares”. Um é a relação que liga a entropia à temperatura:

$$\frac{\partial \ln \omega(E)}{\partial E} = \frac{1}{T}, \quad (4.49)$$

o outro é o fator de Boltzmann

$$\frac{1}{e^{E/T}}. \quad (4.50)$$

Obviamente, os dois “pilares” são relacionado de forma clara no formalismo de BG. Agora, a relação (4.49) só pode definir uma quantidade *intensiva* $1/T$ se a densidade de estados tem a forma

$$\omega(E) \propto [f(E)]^M, \quad (4.51)$$

em relação ao número de elementos M do conjunto canônico. Dado que a presença de correlações [110] é uma característica fundamental dos estados quase-estacionários observados e já que o formalismo de BG se revela inadequado para a descrição da configuração canônica quase-estacionária, podemos supor que a relação funcional entre densidades de estados e número de elementos do sistema canônico seja mais suave, por exemplo uma lei

de potência:

$$\omega(E) \propto M^\rho[f(E)], \quad (4.52)$$

com $\rho > 0$. Neste caso, como antecipado na seção 1.2.2, teríamos que é a relação

$$\frac{\partial \ln_q \omega(E)}{\partial E} = \frac{1}{T_{EQE}}, \quad (4.53)$$

com $q = 1 - 1/\rho$, a definir uma quantidade *intensiva* $1/T_{EQE}$, em lugar da Eq. 4.49. O ponto interessante desta conjectura é que, se por um lado a quantidade $\omega(E) \propto M^\rho[f(E)]$ não é mensurável numericamente para valores de M de apenas algumas dezenas (veja seção 4.1), por uma grandeza da ordem de $\omega(E) \propto M^\rho[f(E)]$ podemos tentar uma abordagem numérica. Uma possibilidade é comparar o volume ocupado no espaço de fases por estados quase-estacionários em relação do volume ocupado pelos estados de equilíbrio. Ao longo destas linhas estamos dirigindo atualmente os nossos esforços [42]. Se se concretizasse a possibilidade de ter uma *estimativa dinâmica* para $\omega(E)$ durante o platô meta-estável, se poderia também *deduzir* o fator de Boltzmann $e^{-E/T}$ ou as suas eventuais generalizações. Isto constituiria uma determinação completamente independente da mecânica estatística associada aos estados quase-estacionários.

Capítulo 5

Conclusões

Neste capítulo apresentamos considerações finais sobre os resultados encontrados ao longo desta tese. Estas conclusões estão organizadas em três linhas principais, seguindo o cenário de fundo dos capítulos anteriores. A idéia básica que motivou os vários trabalhos apresentados foi a tentativa de entender a ligação entre efeitos associados a grandezas macroscópicas e a dinâmica microscópica subjacente. Fizemos isto começando pelos mapas de baixa dimensão, que têm a vantagem de permitir uma visualização direta do espaço de fases, e nos esforçamos em acrescentar dimensões, procurando entender os mecanismos que se preservam neste processo complexo. De fato, as propriedades qualitativas fundamentais da própria estrutura do espaço de fases mudaram radicalmente, já que passamos da análise de sistemas dissipativos para sistemas conservativos, de regiões caóticas desconexas para sistemas com uma rede caótica conexa e densa no espaço de fases. Por outro lado porém, vimos que existem mecanismos dinâmicos que, mesmo atuando em condições tão diferentes, produzem estados quase-estacionários (ou meta-estáveis) anômalos, com características parecidas. Estes estados fora do equilíbrio, sob determinadas condições, acabam sendo os estados fisicamente relevantes para caracterizar o sistema, e produzem efeitos extremamente ricos cujas conseqüências estão entendidas apenas parcialmente.

As três linhas de trabalho foram: o estudo das relações entre a sensibilidade às condições iniciais e uma apropriada forma entrópica que descreva consistentemente a evolução de um

sistema fora do equilíbrio; o estudo do surgimento de platôs dinâmicos quase-estacionários; e por fim a análise do fundamento dinâmico do *ensemble* canônico.

5.1 Sensibilidade às condições iniciais e produção de entropia

O estudo da sensibilidade às condições iniciais e da produção de entropia, ao longo desta tese, foi feito em relação a mapas unimodais e simpléticos de baixa dimensão. De fato, já nestas dimensões o cálculo numérico da produção de entropia requer muitos recursos computacionais [56]. Para os mapas unimodais foram conseguidos resultados analíticos exatos [16, 17, 18], enquanto nos casos dos mapas simpléticos [52, 53, 56, 57] a análise foi principalmente numérica.

5.1.1 Mapas unimodais

Bifurcações de forquilha e tangentes

Para os mapas unimodais começamos estudando a sensibilidade às condições iniciais em correspondência das bifurcações de forquilha e tangentes [16] na seção 2.2. Neste contexto, determinamos completamente o comportamento dinâmico nestes pontos críticos para mapas unimodais de não-linearidade $\zeta > 1$ arbitrária. Isto foi obtido considerando a solução pela relação recursiva de Feigenbaum-Couillet-Tresser [67, 68] para este tipo de pontos críticos. No nosso estudo usamos a forma específica do mapa ζ -logístico, mas os resultados têm validade universal, associada à abordagem de grupo de renormalização. As soluções de grupo de renormalização são exatas e têm a forma analítica de q -exponenciais. Mostramos que elas são a contraparte *temporal* da expressão estática do mapa de ponto fixo encontrada por Hu e Rudnick [75] para a bifurcação tangente e que é também aplicável para as bifurcações de forquilha [74]. A forma q -exponencial da evolução temporal implica numa confirmação analítica pela expressão da sensibilidade às condições iniciais sugeridas pelo

formalismo não-extensivo. Também permite uma predição direta para o parâmetro q e para o coeficiente de Lyapunov generalizado $\bar{\lambda}_q$ em termos das propriedades críticas do mapa. Vimos que o índice q é independente de ζ e tem um entre dois possíveis valores, dependendo se a transição é do tipo de forquilha ou tangente. O coeficiente de Lyapunov generalizado $\bar{\lambda}_q$ é identificado simplesmente com o principal termo da expansão do iterado do mapa em torno do ponto crítico. Estas predições são corroboradas de forma inquestionável por cálculos numéricos *a priori*. Significativamente, ambas as famílias de bifurcações exibem um comportamento dinâmico incomum (seja de insensibilidade fraca ou de sensibilidade super-forte às condições iniciais). O atributo de universalidade destes resultados sugere reflexões sobre comportamentos dinâmicos incomuns. Estes parecem estar ligados ao fato que a forma de tangência do mapa nestes pontos críticos confina efetivamente ou expelle trajetórias, causando uma amostragem anormal e incompleta do espaço de fases (neste caso $-1 \leq x \leq 1$).

Notamos a margem que recentemente Robledo observou uma sugestiva conexão entre estes resultados (especificamente os resultados para a bifurcação tangente) e as flutuações de parâmetros de ordem nas vizinhanças de pontos críticos de sistemas termodinâmicos (veja [127] e referências sugeridas para os detalhes).

O limiar do caos

Passamos depois a estudar o ponto crítico mais intrigante, o limiar do caos [17, 18], na seção 2.3. Novamente, em correspondência da anulação do expoente de Lyapunov os processos dinâmicos se tornam “preguiçosos” para explorar todas as configurações permitidas e são capaz de cobrir somente uma pequena fração do espaço de fases disponível, mesmo no limite de tempo infinito. Esta fração (o atrator) passa a ter um dimensão fractal menor da dimensão total do espaço de fases. Estas são as condições onde se espera que o formalismo estatístico de BG possa ser inadequado e que haja espaço pela aplicabilidade da generalização não-extensiva. A este respeito, o significado dos resultados analíticos da seção 2.3, onde em momento nenhum usamos hipóteses *ad hoc* relacionadas ao formalismo

não-extensivo, representam uma importante contribuição para o esclarecimento deste problema. No limiar do caos, o espaço de fases reduzido é de fato constituído por um atrator estranho, um subconjunto de Cantor do intervalo $-1 \leq x \leq 1$. Por construção, a dinâmica no limiar do caos descreve um regime puramente não-extensivo. É importante ressaltar que neste caso (onde não foi considerada a presença de um termo de ruído aditivo) as possíveis posições (configurações) são assintoticamente confinadas pelo atrator, que atua como uma barreira insuperável para o movimento para outras locações. Isto exclui a possibilidade das trajetórias alcançarem regiões caóticas adjacentes ou vizinhas, como nas configurações estudadas em [76] ou na seção 2.4, ou ainda no caso dos mapas simpléticos do capítulo 3. Como consequência, não existe um veículo de retorno para se ter um *crossover* de um regime não-extensivo com um coeficiente de Lyapunov nulo para um regime de caos usual com um coeficiente positivo, em algum tempo t_{cross} para $t \rightarrow \infty$. Novamente, estes resultados têm uma validade universal para mapas unimodais, conferida pelo tratamento de grupo de renormalização e possivelmente também para outros tipos de sistemas ou situações que possuem equivalentes limitações no espaço de fases.

Mais especificamente, vimos que a dinâmica no limiar do caos pode ser descrita de forma exata através de uma série de subseqüências temporais. Em correspondência a cada uma destas subseqüências, a sensibilidade às condições iniciais ξ_t é descrita por uma lei de potência com a forma exata da função q -exponencial. É natural esperar que isto implique em uma correspondente taxa de produção de entropia a lei de potência associada à dinâmica de *ensembles* de trajetórias. Uma conexão entre estas duas propriedades sugere uma extensão da identidade de Pesin $K_1 = \lambda_1$, $\lambda_1 > 0$ que incorpore o caso $\lambda_1 = 0$. Mas notavelmente, para estudar esta situação, é necessário desenvolver uma teoria que vai além do esquema tradicional de BG para sistemas caóticos e que forneça uma generalização para ambas a entropia de Kolmogorov-Sinai e a sensibilidade às condições iniciais. Uma possível fonte é justamente a estatística não-extensiva que oferece expressões específicas e praticáveis para estas quantidades. Para realizar uma análise epistemologicamente correta deste problema é porém necessário conseguir uma determinação explícita *a priori* de todas as quantidades envolvidas. Mostramos que este é exatamente o caso para o exemplo

específico (mas paradigmático) do mapa logístico. De fato exibimos [17, 18] que o método de grupo de renormalização de Feigenbaum-Coulet-Tresser [67, 68] (que usamos também no caso das bifurcações), do qual a solução estática de ponto-fixo $g(x)$ foi originalmente obtida, é também capaz de representar propriedades dinâmicas, ou seja, a sensibilidade às condições iniciais ξ_t . Tendo uma expressão analítica para λ_q , derivamos uma expressão paralela para a taxa de produção de entropia K_q usando dois ingredientes i) uma distribuição $p_i(t)$ de posições para um *ensemble* de trajetórias e ii) a entropia não-extensiva S_q . O resultado principal, a identidade generalizada $K_q = \lambda_q$, necessita que a entropia de equi-probabilidade tenha precisamente a forma analítica $\ln_q W_t$ (com $q = 1 - \ln 2 / \ln \alpha$ para a subsequência principal) e desta forma distingue *a priori* a expressão do formalismo não-extensivo para a entropia S_q de outras alternativas, incluída a expressão de BG S_1 .

5.1.2 Mapas simpléticos

No caso dos mapas simpléticos, a ausência de um conjunto atrator muda completamente às características geométricas e dinâmicas do espaço de fases destes sistemas em relação daqueles dissipativos. Nas situações complexas descritas pelo teorema KAM a sensibilidade às condições iniciais varia de forma dramática ao longo de uma trajetória, passando de comportamentos exponenciais para comportamentos algébricos e vice-versa [80]. Por esta razão focalizamos a nossa atenção sobre comportamentos estatísticos *globais*, que caracterizam o espaço de fases completo, estudando numericamente o comportamento médio da sensibilidade às condições iniciais e da produção de entropia para *ensembles* de dados fora do equilíbrio. Nestas condições, para os casos de baixa dimensão que estudamos (bi [52, 56, 57] e quadridimensional [53]), observamos o surgimento de um regime dinâmico anômalo - caracterizado por uma sensibilidade às condições iniciais q_s -exponencial com $q_s < 1$ - ao tender do parâmetro de controle para o valor que corresponde à regularidade. Este regime de caos fraco depois de um certo tempo exhibe um *crossover* para o regime de caos forte caracterizado por uma sensibilidade às condições iniciais exponencial. O tempo de *crossover* tende para *infinito* ao tender do parâmetro de controle para o valor que cor-

responde à regularidade. Existem razoáveis expectativas que ao crescer da dimensão do espaço de fases este regime se torne cada vez mais importante, já que aumenta a complexidade e o número de conexões da rede caótica [79], se tornando assim relevante também para sistemas Hamiltonianos de muitos corpos, sob determinadas circunstâncias.

Procuramos então encontrar a forma do funcional entrópico que corresponde a uma taxa de produção de entropia finita (no limite de um número W infinito de (hiper)células constituintes a partição do espaço de fases) durante a fase anômala. Este funcional corresponde à entropia não-extensiva S_{q_e} para valores de $q_e < 1$.

Já que a usual igualdade de Pesin fornece pouca informação em relação deste regime anômalo (não conseguindo, por exemplo, distinguir entre caos fraco e integrabilidade), procuramos generalizar esta igualdade para o caso de sensibilidade algébrica às condições iniciais, usando o formalismo não-extensivo. Descobrimos que neste caso um papel análogo ao dos coeficientes de Lyapunov tradicionais é feito pelo próprio parâmetro q . Desta forma conseguimos conjecturar uma sugestiva explicação pela observada discrepância entre os parâmetros q_s e q_e . Desta diferença é possível ter informações sobre a dimensão associada ao espalhamento dinâmico de um conjunto de dados inicialmente localizados em pequenas regiões específicas do espaço de fases. O aprofundamento desta questão é atualmente em andamento e passa pela definição de um *espectro* de coeficientes de Lyapunov generalizados [90].

Um outro ponto interessante a ser analisado em futuro é uma possível conexão com a teoria super-estatística apresentada na seção 1.4. Existindo regiões de forte caos com valores diferentes para o coeficiente de Lyapunov tradicional, no espírito da super-estatística pode-se estudar a distribuição destes coeficientes. Se poderiam encontrar situações específicas caracterizadas por duas escalas temporais: uma de curto prazo onde a sensibilidade às condições iniciais é exponencial; e uma de longo prazo possivelmente caracterizada por uma sensibilidade super-exponencial com $q > 1$.

Uma observação conclusiva sobre os resultados relativos à produção de entropia e à sensibilidade às condições iniciais está relacionada com o fato que fenômenos anômalos neste contexto são tipicamente associados a valores de $q < 1$, enquanto a maioria de fenômenos

não-extensivos observados experimentalmente usam $q > 1$. Esta objeção é superada pela mencionada *dualidade* intrínseca do formalismo não-extensivo (1.2.1), definida por exemplo através das duas formas funcionais conjugadas S_q (1.19) e $S_{q^\dagger}^\dagger$ (1.20) [18], com $S_{q^\dagger}^\dagger = S_{2-q}$.

5.2 Surgimento de platôs quase-estacionários

Durante esta tese observamos o surgimento de estados quase-estacionários, caracterizados por platôs meta-estáveis, em vários sistemas dinâmicos. Especificamente, para mapas unimodais com ruído aditivo [63], para mapas simpléticos globalmente acoplados [63, 64, 65, 66], e enfim para sistemas Hamiltonianos de muitos corpos com interação de longo alcance [60, 61, 63]. Nas próximas seções apresentamos considerações finais neste contexto, primeiro para os vários casos específicos, e discutimos finalmente sugestivas semelhanças entre estes processos.

5.2.1 Mapas unimodais

Os platôs quase-estacionários observados no contexto de mapas unimodais com ruído aditivo [62, 63] têm significativas analogias com estados vítreos. Com efeito, um processo de relaxação em dois passos é uma das características principais exibidas por líquidos super-resfriados nas vizinhanças da formação de um vidro [88]. Duas outras características da dinâmica de sistemas vítreos são a chamada fórmula de Adam-Gibbs e a propriedade de escalamento conhecida como *envelhecimento*. A primeira é uma relação entre um tempo de relaxação t_c (por exemplo, a viscosidade ou o inverso de difusibilidade) e a entropia S_{conf} associada ao número de possíveis mínimos da energia das configurações moleculares no fluido [88]. O segundo é a perda de invariância translacional temporal (chamada envelhecimento [128]), devido ao fato que as propriedades dos vidros dependem do procedimento usado para obtê-los. A diminuição do tempo de relaxação de funções de correlação mostra uma dependência de escala na razão t/t_w , onde t_w é um tempo de espera. Como contraparte da fórmula de Adam-Gibbs, foi recentemente mostrado [62] que o mapa logístico em

μ_∞ para intensidade de ruído $\sigma \neq 0$ apresenta uma relação entre a duração do platô t_c , e a entropia S_{conf} para o estado que compreende o número maior de bandas de posições iteradas permitidas pela intensidade do ruído. Esta entropia é obtida da probabilidade de ocupação de bandas caóticas na posição x [62]. Além disso, foi exibido [62] que as trajetórias em μ_∞ no limite $\sigma \rightarrow 0$ obedecem a uma relação de escalamento característica do envelhecimento, na forma $x_{t+t_w} = g^{(t_w)}(0) \exp_q(-\lambda_q t/t_w)$ onde $g^{(t_w)}(0)$ é o mapa de ponto-fixa de Feigenbaum $g(0)$ composto t_w vezes.

Na seção 2.4 corroboramos estes resultados com uma abordagem numérica [63] que conseguiu confirmar a relação de escala para o tempo de *crossover* $t_c \sim \sigma^{-1}$, e permitiu a observação do novo efeito de estruturas *múltiplas* de platôs para o caso do mapa logístico com ruído aditivo. Explicamos este comportamento em termos de sucessivos confinamentos dinâmicos em regiões do atrator de Feigenbaum ($\sigma \rightarrow 0$), onde, lembramos, o formalismo não-extensivo se aplica de forma exata [17, 18].

5.2.2 Mapas simpléticos

No caso dos mapas simpléticos globalmente acoplados, através da definição de uma apropriada *temperatura dinâmica* [64] e de análise numéricas [63, 64, 65, 66], mostramos como estruturas complexas paradigmáticas para sistemas conservativos não-lineares podem gerar um comportamento termodinâmico anômalo (seção 3.3). Especificamente, exibimos e estudamos o surgimento, quando o sistema se aproxima da integrabilidade (ou seja, quando a caoticidade decresce), de estados quase-estacionários sugestivamente similares com aqueles observados em sistemas Hamiltonianos de muitos corpos com interação de longo alcance [55, 85, 86]. Um resultado central é que, em contraste com o que acontece no equilíbrio de BG, estes estados quase-estacionários correspondem, pelo menos nos casos de baixa dimensão, a uma dimensão fractal não trivial. Esta situação lembra a estrutura do espaço de fases dos mapas unimodais no limiar do caos (caracterizados também por uma dimensão fractal não trivial). A duração destes platôs diverge, seja quando os parâmetros de controle do caos tendem para os valores que correspondem à integrabilidade, seja quando se

considera o limite de um número infinito de mapas acoplados.

A metodologia básica da mecânica estatística de equilíbrio consiste em eliminar a variável temporal, como pode ser justificado por exemplo pela hipótese ergódica. No caso dos platôs de baixa dimensão dos mapas simpléticos, ilustramos que médias de *ensemble* e médias temporais exibem comportamentos diferentes [65], devido à complexidade do espaço de fases. Uma única média temporal da temperatura dinâmica mostra um comportamento intermitente. Em contraste, fazendo uma média sobre muitas destas realizações com um tempo de observação suficientemente grande, observamos o surgimento de uma estrutura de dois platôs parecida aquela obtida com médias de *ensemble*. Seria interessante aplicar o estudo das médias temporais ao caso multidimensional, recentemente abordado em [63], caracterizado por centenas de mapas simpléticos globalmente acoplados.

5.2.3 Sistemas Hamiltonianos de muitos corpos

Na seção 4.2 descrevemos os platôs quase estacionários associados ao modelo Hamiltoniano de campo médio, um modelo Hamiltoniano de muitos corpos com interação de alcance infinito [61]. Tratamos também de aspectos básicos relacionados à uma abordagem de ensemble canônico para estes platôs [60, 63]. Lembramos que nos últimos anos, o estudo de sistemas com interações de longo alcance tem atraído um considerável interesse na literatura (veja, por exemplo, [96] e referências ali contidas). Em particular, progressos significativos foram obtidos na descrição e compreensão de estados quase-estacionários fora o equilíbrio que não podem se encaixar no cenário de BG. Estes estados quase-estacionários exibem um platô de temperatura anômala [59] e várias outras anomalias que são consistentes com o formalismo estatístico não-extensivo [61]. Entre elas, coeficientes de Lyapunov que se anulam, vãos de Lévy e difusão anômala, envelhecimento caracterizado por funções de correlação temporal q -exponenciais (assintoticamente a lei de potência) [110], distribuição marginal de partícula única q -exponencial e relaxação q -exponencial para o equilíbrio de BG.

Querendo então propor uma abordagem de mecânica estatística generalizada para a

descrição destes estados quase-estacionários, um passo fundamental é relacionado à validade do princípio zero da termodinâmica em correspondência destes estados. Mostramos numericamente [60, 63] que esta lei básica da termodinâmica se aplica também para estes estados quase-estacionários, e tem portanto um domínio de validade que é maior do que aquele normalmente associado dentro da mecânica estatística de BG. Exibimos também provas que a temperatura dinâmica destes estados quase-estacionários é na realidade mensurável através de um termômetro usual de curto-alcance. Estes resultados estabelecem um terreno sólido para outras pesquisas neste contexto.

5.2.4 Discussão

No contexto do surgimento de platôs quase-estacionários analisamos então três sistemas dinâmicos bastante diferentes. Primeiro o mapa logístico com ruído aditivo no limiar do caos, em seguida um sistema composto por mapas *standard* globalmente acoplados de maneira simplética, e finalmente o modelo Hamiltoniano de campo médio. Em todos estes três casos existe uma característica dinâmica comum: o surgimento, para certas classes de condições iniciais e para determinados valores dos parâmetros de controle (os parâmetros de controle da caoticidade para os mapas, a energia total específica no caso do modelo Hamiltoniano de campo médio), de estados meta-estáveis que depois de um certo tempo evoluem para um estado de equilíbrio. Estes estados meta-estáveis ou quase-estacionários parecem ser intimamente ligados a uma ocupação parcial, não trivial, do espaço de fases, tipicamente (multi)fractal (invariante de escala e possivelmente constituindo uma *rede*). Esta característica, no entanto, confina o sistema num estado não-ergódico no qual ele é impossibilitado de alcançar todas as regiões disponíveis do espaço de fases. Uma descrição detalhada para esta situação pode ser dada para o caso do mapa logístico com ruído aditivo no limiar do caos, ou seja, o intercâmbio dinâmico entre um atrator e um repulsor multifractais. Esta circunstância pode também ser reconhecida no caso mais complexo de dois mapas *standard* acoplados, já que os nossos cálculos mostraram claramente o surgimento de platôs quase-estacionários caracterizados por uma ocupação fractal (possivelmente mul-

tifractal) do espaço de fases, e os seus *crossovers* para o comportamento caótico usual, caracterizado por uma ocupação da dimensão completa do espaço de fases. Vimos também que este comportamento de dois platôs permanece no caso de centenas de mapas *standard* acoplados e podemos então avançar a hipótese que uma ocupação fractal do espaço de fases acontece também para um espaço de fases multidimensional. As semelhanças observadas entre os mapas simpléticos globalmente acoplados e o modelo Hamiltoniano de campo médio indicam que o mesmo tipo de fenômenos pode acontecer no caso dos estados quase-estacionários detectados no modelo Hamiltoniano de campo médio, um sistema onde uma análise direta do espaço Γ é muito mais difícil.

A importância destes resultados é enfatizada pelo fato que os estados quase-estacionários se tornam *permanentes* se os limites convencionais são considerados numa ordem específica, por exemplo, o limite termodinâmico antes do limite de tempo infinito no caso do modelo Hamiltoniano de campo médio. Existe então uma convergência não uniforme na evolução dinâmica que leva a uma situação atípica de estado estacionário. A não comutatividade dos limites acontece também no caso dos mapas. Para os mapas *standard* acoplados isto se vê quando o limite termodinâmico é substituído (para a fixo) pelo limite de número infinito de mapas acoplados, ou quando o parâmetro de caoticidade a tende (para N fixo) para valores específicos ($a = 0$ para $d > 2$, e a_c se $d = 2$); enquanto que no caso do mapa logístico é o limite de ruído nulo que tem um papel análogo.

Se encontram várias outras características comuns nos estados quase-estacionários destes sistemas diferentes. Por exemplo, *em todos eles, o espectro completo dos coeficientes de Lyapunov se anula*, efeito que parece ser pivô das anomalias observadas. Também, envelhecimento e propriedades vítreas estão presentes tanto no mapa logístico com ruído aditivo como no modelo Hamiltoniano de campo médio.

Todas estas características sugerem uma conexão básica profunda entre estes sistemas. Como vimos, a estatística usual de BG parece ser inadequada para explicar os estados meta-estáveis, e é necessária uma generalização do formalismo tradicional. A este respeito, a teoria não-extensiva surge como o mais forte candidato para superar este teste.

5.3 Derivação dinâmica do ensemble canônico

Um dos últimos resultados conseguidos nesta tese em termos temporais foi a exibição da fundamentação dinâmica do formalismo de ensemble canônico de BG [58]. Com efeito, usando o formalismo usual de BG e técnicas numéricas comuns, na seção 4.1 introduzimos um novo esquema de cálculo que permite uma comparação entre dinâmica Newtoniana não-linear e mecânica estatística de *ensemble* canônico. Implementando uma configuração padrão, mostramos de fato que a distribuição de energias no espaço Γ coincide com aquela obtida dinamicamente (integrando as equações de Hamilton) quando se realiza uma média de *ensemble* dinâmica. Isto acontece independentemente do regime dinâmico analisado. Verificamos esta conclusão para dois sistemas Hamiltonianos não-lineares paradigmáticos, com interação a primeiros vizinhos. Como resultado colateral, este cálculo fornece uma confirmação dinâmica da conhecida relação entre temperatura e energia cinética específica $k = T/2$ (para sistemas unidimensionais). A situação é diferente para as médias de tempo finito. Enquanto que para baixas temperaturas (energias) encontramos uma confirmação das predições de BG, no caso de modelo XY encontramos que, para altas energias, as médias de tempo finito não estão em concordância com aquelas de *ensemble* (ao menos que a escala temporal não seja *muito* grande), devido ao incremento da escala temporal das flutuações normais de energia. A dependência em energia desta discrepância não mostra correlação com o comportamento do coeficiente máximo de Lyapunov (veja também [4, 5]). Uma possível explicação para este efeito é que além do valor numérico que caracteriza o coeficiente de Lyapunov, em determinadas circunstâncias (também no caso de interações de curto alcance) possa ser importante a *direção* associada ao coeficiente máximo de Lyapunov, para poder ter uma representação consistente das propriedades de relaxação dinâmica associada à ergodicidade.

Queremos enfatizar que mostramos que a mecânica estatística de equilíbrio térmico deriva *exclusivamente* da mecânica, *também para um sistema em presença de um termóstato* (usualmente discutido através de técnica tipo Monte Carlo, que não deduzem a distribuição de equilíbrio, mas a impõem *a priori*). De fato é isto o significado das Figs. 4.2(a-c) e 4.4.

onde os círculos e as cruzes foram obtidas da lei de Newton, enquanto as linhas contínuas provém da teoria de BG. Equivalentemente, lembrando que a densidade de estados é um conceito *puramente* mecânico, a mesma conclusão é mostrada na Fig. 4.3. Este esquema de cálculo fornece uma contribuição para o aprofundamento da questão básica do fundamento dinâmico da mecânica estatística [2, 3, 4, 5, 6, 93], e serve como útil instrumento de análise para a discussão de situações complexas onde se encontram desvios dinâmicos da teoria de BG.

É esta a perspectiva que estamos estudando em relação dos estados quase-estacionários exibidos pelo modelo Hamiltoniano de Campo Médio, perto do ponto crítico e quando se consideram condições iniciais fora do equilíbrio [42]. Na seção 4.2.3 mostramos de fato que o formalismo de BG resulta decididamente inadequado para descrever estes estados meta-estáveis. Discutimos também um possível cenário que poderia dar contribuições muito importantes a este respeito.

Apêndice A

Solução canônica de BG do modelo XY inercial unidimensional

A.1 Primeiros vizinhos em $d = 1$

Neste apêndice revisitamos a solução canônica analítica de BG do modelo inercial XY ferromagnético com interação entre primeiros vizinhos (veja, por exemplo, [4]). A Hamiltoniana é dada por

$$H_M = K_M + V_M = \sum_{i=1}^M \left[\frac{p_i^2}{2} + 1 - \cos(q_{i+1} - q_i) \right], \quad (\text{A.1})$$

onde $q_i \in [0, 2\pi)$, $p_i \in \mathbb{R}$. Temos que calcular a função de partição

$$Z_M = \int \prod_{i=1}^M (dp_i dq_i) \exp[-\beta H_M(p_i, q_i)]. \quad (\text{A.2})$$

Já que estaremos interessados no limite termodinâmico $M \rightarrow \infty$, para evitar complicações formais usamos para este cálculo condições de contorno livres.

A integração sobre os momentos p_i é realizada trivialmente e fornece um fator

$$\left(\frac{2\pi}{\beta} \right)^{\frac{M}{2}}, \quad (\text{A.3})$$

onde $\beta \equiv 1/T$ ($k_B \equiv 1$).

Para calcular a integral das configurações, realizamos primeiro a seguinte transformação de coordenadas:

$$\begin{aligned}\omega_1 &\equiv q_2 - q_1, \\ &\vdots \\ \omega_{M-1} &\equiv q_M - q_{M-1}, \\ \omega_M &\equiv \bar{q} - q_M, \\ \bar{\omega} &\equiv \bar{q},\end{aligned}\tag{A.4}$$

onde $\omega_i \in [0, 2\pi)$ e $\bar{\omega}, \bar{q}$ não são verdadeiras coordenadas, mas parâmetros. É fácil verificar que o determinante Jacobiano desta transformação é não-singular

$$\det \left(\frac{\partial(\omega_1 \dots \omega_M \bar{\omega})}{\partial(q_1 \dots q_M \bar{q})} \right) = 1.\tag{A.5}$$

A existência do limite termodinâmico para esta transformação de variáveis é verificada analisando a contribuição da coordenada $\bar{\omega}$ à energia livre. Com efeito temos

$$\begin{aligned}Z_M &= \left(\frac{2\pi}{\beta} \right)^{\frac{M}{2}} \int_0^{2\pi} \prod_{i=1}^M d\omega_i \exp \left[-\beta \sum_{i=1}^M (\cos \omega_i) \right] \exp(-\beta M) \\ &= \left(\frac{2\pi}{\beta} \right)^{\frac{M}{2}} \exp(-\beta M) [I_0(\beta)]^M g(\bar{\omega}) (2\pi)^M,\end{aligned}\tag{A.6}$$

onde I_0 é a função modificada de Bessel da primeira espécie de ordem zero, e g é uma função não especificada.

A energia livre específica

$$f_M = -\frac{1}{M\beta} \ln Z_M\tag{A.7}$$

é dada portanto por

$$f_M = -T \left[\frac{1}{2} \ln T + \ln I_0 \left(\frac{1}{T} \right) + \ln 2\pi^{\frac{3}{2}} \right] + 1 + O \left(\frac{1}{M} \right),\tag{A.8}$$

onde a contribuição $O \left(\frac{1}{M} \right)$, desprezível no limite termodinâmico, vem da função $g(\bar{\omega})$.

Invertendo a relação que define a energia específica,

$$e = \frac{\partial(\beta f)}{\partial \beta},\tag{A.9}$$

obtemos a curva calórica $T(e)$ representada em Fig. A.1.

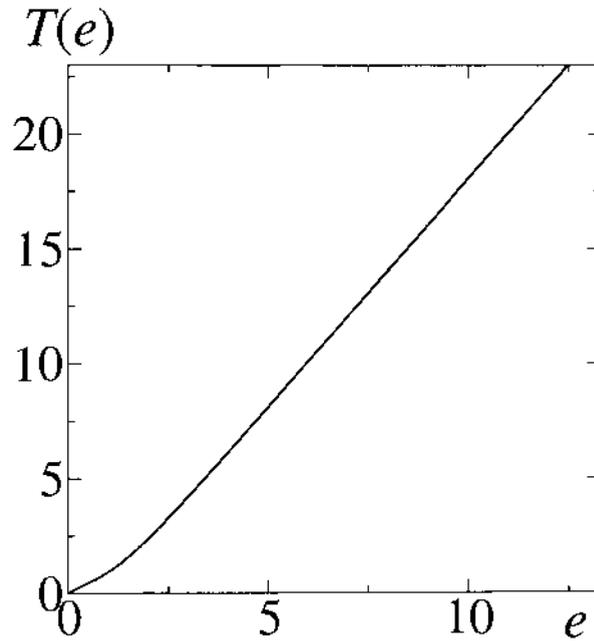


Figura A.1: Curva calórica obtida da solução analítica de *ensemble* canônico de BG do modelo inercial XY ferromagnético com interação entre primeiros vizinhos.

A.2 Alcance infinito

Passamos agora a analisar o caso do modelo Hamiltoniano dito de campo médio (veja, por exemplo, [97]). A Hamiltoniana é dada por

$$H = K + V = \sum_{i=1}^M \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2M} \sum_{i,j=1}^M [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)], \quad (\text{A.10})$$

onde $\theta_i \in [0, 2\pi)$ e $p_i \in \mathbb{R}$. Temos que calcular a função de partição

$$Z_M = \int \prod_{i=1}^M (dp_i dq_i) \exp[-\beta H_M(p_i, q_i)], \quad (\text{A.11})$$

com $\beta \equiv 1/T$, $k_B \equiv 1$.

A integração sobre os momentos p_i é realizada trivialmente e fornece um fator

$$\left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{\frac{M}{2}}. \quad (\text{A.12})$$

A função de partição agora é dada por

$$\begin{aligned} Z_M &= \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{\frac{M}{2}} \int_0^{2\pi} \prod_{i=1}^M d\theta_i \exp\left[-\frac{\beta}{2M} \sum_{i,j=1}^M \cos(\theta_i - \theta_j)\right] \exp\left(-\frac{\beta M}{2}\right) \\ &= C \int_0^{2\pi} \prod_{i=1}^M d\theta_i \exp\left[-\frac{\beta}{2M} \sum_{i,j=1}^M \cos(\theta_i - \theta_j)\right], \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

com

$$C \equiv \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{\frac{M}{2}} \exp\left(-\frac{\beta M}{2}\right). \quad (\text{A.14})$$

Para calcular este integral, observamos primeiro a identidade

$$\sum_{i,j=1}^M \cos(\theta_i - \theta_j) = \left(\sum_{i=1}^M \cos \theta_i\right)^2 + \left(\sum_{i=1}^M \sin \theta_i\right)^2 = \left|\sum_{i=1}^M \mathbf{m}_i\right|^2 = M^2 \mathbf{m}^2. \quad (\text{A.15})$$

onde, lembramos,

$$\mathbf{m} \equiv \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \mathbf{m}_i, \quad \mathbf{m}_i \equiv [\cos(\theta_i), \sin(\theta_i)]. \quad (\text{A.16})$$

Temos então

$$Z_M = C \int_0^{2\pi} \prod_{i=1}^M d\theta_i \exp\left(-\frac{\beta M}{2} \mathbf{m}^2\right). \quad (\text{A.17})$$

Consideramos agora a identidade Gaussiana

$$\exp\left(\frac{\mu}{2} \mathbf{v}^2\right) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{w} \exp\left(-\mathbf{w}^2 + \sqrt{2\mu} \mathbf{v} \cdot \mathbf{w}\right), \quad (\text{A.18})$$

onde \mathbf{v} e \mathbf{w} são vetores bidimensionais e μ é positivo. Podemos portanto reescrever a função de partição como

$$Z_M = \frac{C}{\pi} \int_0^{2\pi} \prod_{i=1}^M d\theta_i \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{w} \exp\left(-\mathbf{w}^2 + \sqrt{2\mu} \mathbf{m} \cdot \mathbf{w}\right), \quad (\text{A.19})$$

onde $\mu = \beta M$. Introduzindo a variável rescalada $\mathbf{w} \rightarrow \mathbf{w} \sqrt{M/(2\beta)}$ e trocando a ordem de integração obtemos

$$\begin{aligned} Z_M &= \frac{MC}{2\pi\beta} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{w} \exp\left(-\frac{M\mathbf{w}^2}{2\beta}\right) \int_0^{2\pi} \prod_{i=1}^M d\theta_i \exp\left(\sum_{i=1}^M w_x \cos \theta_i + w_y \sin \theta_i\right) \\ &= \frac{MC}{2\pi\beta} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{w} \exp\left\{-M \left[\frac{w^2}{2\beta} - \ln(2\pi I_0(w))\right]\right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

onde I_0 é a função modificada de Bessel da primeira espécie de ordem zero e w é o módulo de \mathbf{w} . Esta última integral pode ser avaliada com a técnica de ponto de sela. no limite termodinâmico $M \rightarrow \infty$. Neste limite, a energia livre de Helmholtz específica

$$f = - \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M\beta} \ln Z_M, \quad (\text{A.21})$$

é dada portanto por

$$f = \frac{1}{2} - \frac{1}{\beta} \left\{ \frac{1}{2} \ln \left(\frac{2\pi}{\beta} \right) - \max_w \left[\frac{w^2}{2\beta} - \ln(2\pi I_0(w)) \right] \right\}, \quad (\text{A.22})$$

com a condição de máximo que leva para esta equação de consistência:

$$\frac{w}{\beta} = \frac{I_1(w)}{I_0(w)}, \quad (\text{A.23})$$

onde I_0 é a função modificada de Bessel da primeira espécie da ordem 1.

A Eq. (A.23) é análoga, para o modelo XY inercial, à equação de Curie-Weiss obtida resolvendo o modelo de Ising na aproximação de campo médio. Para $\beta \leq \beta_c \equiv 2$, a equação apresenta somente a solução $\bar{w} = 0$, que é instável. Para $\beta \geq \beta_c$, ou seja, abaixo da temperatura crítica $T_c = 0.5$, duas novas soluções estáveis simétricas aparecem através de uma bifurcação de forquilha, e é presente uma descontinuidade na derivada segunda da energia livre, indicando uma transição de segunda ordem.

Este resultado é confirmado por uma análise do parâmetro de ordem¹

$$m = \frac{I_1(\bar{w})}{I_0(\bar{w})}. \quad (\text{A.24})$$

A magnetização se anula de maneira contínua em β_c . Já que a magnetização mede o grau de agregamento das partículas, temos uma transição de uma fase agregada quando $\beta > \beta_c$, para uma fase homogênea quando $\beta < \beta_c$. O expoente que caracteriza o comportamento da magnetização perto do ponto crítico vale $1/2$, como esperado para um modelo de campo médio [102].

¹Isto é realizado adicionando ao Hamiltoniano um campo externo e considerando a derivada da energia livre em relação a este campo, calculada para campo nulo.

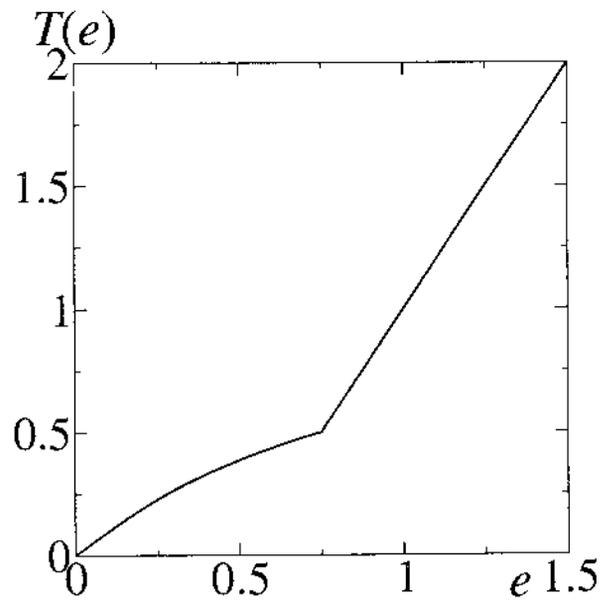


Figura A.2: Curva calórica obtida da solução analítica de *ensemble* canônico de BG do modelo inercial XY ferromagnético com interação de alcance infinito.

Através da relação que define a energia específica

$$e = \frac{\partial(\beta f)}{\partial\beta}, \quad (\text{A.25})$$

temos

$$e = \frac{1}{2\beta} + \frac{1}{2}(1 - m^2). \quad (\text{A.26})$$

Invertendo esta relação obtemos a curva calórica representada em Fig. A.2.

Apêndice B

Solução canônica de BG do modelo β de Fermi-Pasta-Ulam

Neste apêndice revistamos a solução canônica analítica de BG do modelo β de Fermi-Pasta-Ulam com interação entre primeiros vizinhos (veja, por exemplo, [4]). A Hamiltoniana é dada por

$$H_M = K_M + V_M = \sum_{i=1}^M \left[\frac{p_i^2}{2} + \frac{(q_{i+1} - q_i)^2}{2} + \lambda \frac{(q_{i+1} - q_i)^4}{4} \right], \quad (\text{B.1})$$

onde $q_i, p_i \in \mathbb{R}$, e queremos calcular a função de partição

$$Z_M = \int \prod_{i=1}^M (dp_i dq_i) \exp[-\beta H_M(p_i, q_i)], \quad (\text{B.2})$$

onde, novamente, $\beta \equiv 1/T$ ($k_B \equiv 1$), e usamos para este cálculo condições de contorno livres.

A integração sobre os momentos p_i é realizada trivialmente e fornece um fator

$$\left(\frac{2\pi}{\beta} \right)^{\frac{M}{2}}. \quad (\text{B.3})$$

Para calcular a integral das configurações realizamos a mesma transformação de coor-

denadas do apêndice A.1:

$$\begin{aligned}
 \varphi_1 &\equiv q_2 - q_1, \\
 &\vdots \\
 \varphi_{M-1} &\equiv q_M - q_{M-1}, \\
 \varphi_M &\equiv \bar{q} - q_M, \\
 \bar{\varphi} &\equiv \bar{q},
 \end{aligned}
 \tag{B.4}$$

onde $\bar{\varphi}$ e \bar{q} são parâmetros, e o determinante Jacobiano é igual a 1. Temos então

$$\begin{aligned}
 Z_M &= \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{\frac{M}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{i=1}^M d\varphi_i \exp \left[-\beta \sum_{i=1}^M \left(\frac{\varphi_i^2}{2} + \lambda \frac{\varphi_i^4}{4} \right) \right] \\
 &= \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{\frac{M}{2}} \left\{ \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \left(\frac{\beta\lambda}{2}\right)^{-\frac{1}{4}} \exp\left(\frac{\beta}{8\lambda}\right) D_{-\frac{1}{2}} \left[\left(\frac{\beta}{2\lambda}\right)^{\frac{1}{2}} \right] \right\}^M f(\bar{\varphi}),
 \end{aligned}
 \tag{B.5}$$

onde Γ é a função gama de Euler, $D_{-\frac{1}{2}}$ é uma função cilíndrica parabólica, e f é uma função não especificada.

A energia livre específica

$$f_M = -\frac{1}{M\beta} \ln Z_M
 \tag{B.6}$$

é dada portanto por

$$\begin{aligned}
 f_M &= -\frac{1}{2}T \ln(2\pi T) - T \ln \left[\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \right] + \frac{1}{4}T \ln \left(\frac{\lambda}{2T} \right) + \\
 &\quad -T \ln \left\{ D_{-\frac{1}{2}} \left[\left(\frac{1}{2\lambda T} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \right\} - \frac{1}{8\lambda} + O\left(\frac{1}{M}\right),
 \end{aligned}
 \tag{B.7}$$

onde a contribuição $O\left(\frac{1}{M}\right)$, desprezível no limite termodinâmico, vem da função $f(\bar{\varphi})$.

Invertendo a relação que define a energia específica,

$$e = \frac{\partial(\beta f)}{\partial \beta},
 \tag{B.8}$$

obtemos a curva calórica $T(e)$ representada em Fig. B.1.

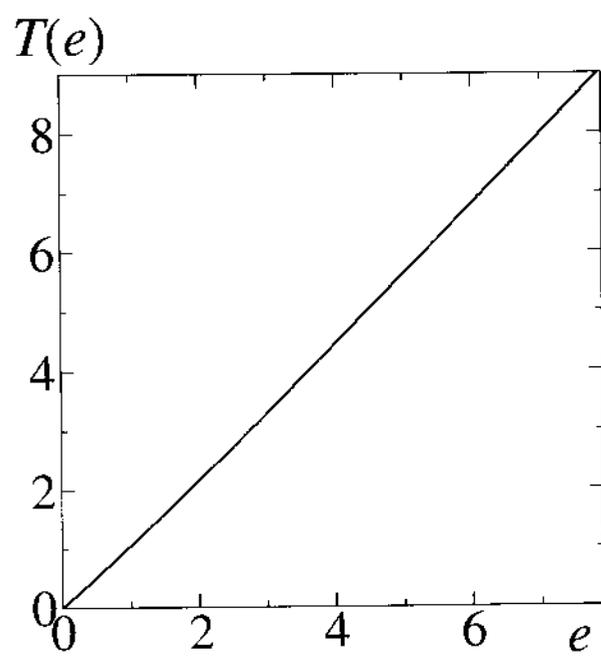


Figura B.1: Curva calórica obtida da solução analítica de *ensemble* canônico de BG do modelo β de Fermi-Pasta-Ulam.

Bibliografia

- [1] S. Salinas *Introdução à Física Estatística*, (Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, 1999).
- [2] A. Einstein, *Annalen der Physik* **33**, 1275 (1910): [“Usually W is put equal to the number of complexions... 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. $S = \frac{R}{N} \log W + \text{const.}$ seems without content, from a phenomenological point of view, without giving in addition such an *Elementartheorie*.” (Translation: Abraham Pais, *Subtle is the Lord...*, Oxford University Press, 1982)].
- [3] E.G.D. Cohen, *Physica A* **305**, 19 (2002).
- [4] R. Livi, M. Pettini, S. Ruffo e A. Vulpiani, *J. Stat. Phys.* **48**, 539 (1987).
- [5] D. Escande, H. Kantz, R. Livi e S. Ruffo, *J. Stat. Phys.* **76**, 605 (1994).
- [6] L. Casetti, M. Pettini e E.G.D. Cohen, *Phys. Rep.* **337**, 237 (2000).
- [7] C. Beck e F. Schlogl, *Thermodynamics of Chaotic Systems* (Cambridge University Press, UK, 1993).
- [8] H.G. Schuster, *Deterministic Chaos. An Introduction*, 2nd Revised Edition (VHC Publishers, Weinheim, 1988).

- [9] E. Ott, *Chaos in dynamical systems* (Cambridge University Press, UK, 1993).
- [10] F. Baldovin, M. Novello, S.E.P. Bergliaffa e J.M. Salim, *Class. Quant. Grav.* **17**, 3265 (2000).
- [11] C. Tsallis, *J. Stat. Phys.* **52**, 479 (1988).
- [12] C. Beck, G.S. Lewis e H.L. Swinney, *Phys. Rev. E* **63**, 035303 (2001); C. Beck, *Physica A* **295**, 195 (2001);
- [13] C. Beck, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 180601 (2001).
- [14] T. Arimitsu e N. Arimitsu, *Physica A* **305**, 218 (2002).
- [15] I. Bediaga, E.M.F. Curado e J. Miranda, *Physica A* **286**, 156 (2000); C. Beck, *Physica A* **286**, 164 (2000).
- [16] F. Baldovin e A. Robledo, *Europhys. Lett.* **60**, 518 (2002);
- [17] F. Baldovin e A. Robledo, *Phys. Rev. E* **66**, 045104(R) (2002);
- [18] F. Baldovin e A. Robledo, trabalho submetido [cond-mat/0304410].
- [19] Y.S. Weinstein, S. Lloyd e C. Tsallis, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 214101 (2002);
- [20] A. Taruya e M. Sakagami, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 181101 (2003).
- [21] S. Gheorghiu, J.R. van Ommen, adn M.-O. Coppens, *Phys. Rev. E* **67** 041305 (2003).
- [22] L. Borland, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 098701 (2002).
- [23] A. Upadhyaya, J.-P. Ricu, J.A. Glazier e Y. Sawada, *Physica A* **293**, 549 (2001).
- [24] B. Lesche, *J. Stat. Phys.* **27**, 419 (1982).
- [25] E. Fermi, *Thermodynamics* (1936): ["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.”].

L. Tisza, *Annals Phys.* **13**, 1 (1961), ou em *Generalized thermodynamics*, (MIT Press, Cambridge, 1966), p. 123: [“The situation is different for the additivity postulate *P a2*, 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 *P d1*. 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.”].

P.T. Landsberg, *Thermodynamics and Statistical Mechanics*, (Oxford University Press, Oxford, 1978; também Dover, 1990), page 102: [“The presence of long-range forces causes important amendments to thermodynamics, some of which are not fully investigated as yet.”].

F. Takens, *Structures in dynamics - Finite dimensional deterministic studies*, eds. H.W. Broer, F. Dumortier, S.J. van Strien e F. Takens (North-Holland, Amsterdam, 1991), page 253: [“The values of p_i are determined by the following dogma: if the energy of the system in the i^{th} state is E_i and if the temperature of the system is T then: $p_i = \exp\{-E_i/kT\}/Z(T)$, where $Z(T) = \sum_i \exp\{-E_i/kT\}$. (this last constant is taken so that $\sum_i p_i = 1$). This choice of p_i is called *Gibbs distribution*. We shall give no justification for this dogma; even a physicist like Ruelle disposes of this question as “deep and incompletely clarified”.”].

- [26] C. Tsallis, F. Baldovin, R. Cerbino e P. Pierobon *Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics and Thermodynamics*, para aparecer nos Proceedings da escola de verão internacional de Física 1953-2003 Jubilee “Enrico Fermi” *The Physics of Complex Systems: New Advances & Perspectives*, Diretores F. Mallamace e H.E. Stanley (1-11 July 2003, Varenna sul lago di Como).

- [27] M.L.D. Ion e D.B. Ion, Phys. Lett. B **482**, 57 (2000); D.B. Ion e M.L.D. Ion, Phys. Lett. B **519**, 63 (2001);
- [28] C. Tsallis em *Nonextensive Entropy: Interdisciplinary Applications*, eds. M. Gell-Mann e C. Tsallis (Oxford University Press, New York, 2004).
- [29] S. Abe, Phys. Rcv. E **66**, 046134 (2002).
- [30] A. Renyi, Proc. 4th Berkeley Symposium (1960).
- [31] P.T. Landsberg e V. Vedral, Phys. Lett. A **247**, 211 (1998).
- [32] A.K. Rajagopal e S. Abe, Phys. Rev. Lett. **83**, 1711 (1999).
- [33] C. Tsallis, R.S. Mendes e A.R. Plastino, Physica A **261**, 534 (1998).
- [34] C. Tsallis e E. Brigatti, em *Extensive and non-extensive entropy and statistical mechanics*, número especial de Continuum Mechanics and Thermodynamics, ed. M. Sugiyama (Springer, 2003) [cond-mat/0305606].
- [35] P. Jizba e T. Arimitsu, Phys. Rev. E **69** 026128 (2004).
- [36] Ya. Pesin, Russ. Math. Surveys **32** (1977) 55; Ya. Pesin em *Hamiltonian Dynamical Systems: A Reprint Selection*, eds. R.S. MacKay and J.D. Meiss (Adam Hilger, Bristol, 1987).
- [37] C. Beck, *Spatio-Temporal Chaos e Vacuum Fluctuations of Quantized Fields* (World Scientific, 2002), p. 120.
- [38] C. Tsallis, S.V.F Levy, A.M.C. de Souza e R. Maynard, Phys. Rev. Lett. **75**, 3589 (1995); Erratum: Phys. Rev. Lett. **77**, 5442 (1996); D. Prato e C. Tsallis, Phys. Rev. E **60**, 2398 (1999).
- [39] E.M.F. Curado e C. Tsallis, J. Phys. A **24**, L69 (1991) [Corrigenda: **24**, 3187 (1991) e **25**, 1019 (1992)].

- [40] C. Tsallis, para aparecer num volume especial de *Physica D* do título *Anomalous Distributions, Nonlinear Dynamics and Nonextensivity*, eds. H.L. Swinney e C. Tsallis (2004), em preparação.
- [41] J. Naudts. *Physica A* **332**, 279 (2004).
- [42] F. Baldovin, L.G. Moyano e C. Tsallis, *Non-Gibbsian distribution in quasi-stationary states of a long-range Hamiltonian system*, trabalho em andamento.
- [43] A. Plastino e A.R. Plastino, *Phys. Lett. A* **226**, 257 (1997).
- [44] C. Beck e E.G.D. Cohen, *Physica A* **322**, 267 (2003).
- [45] C. Tsallis e A.M.C. Souza, *Phys. Rev. E* **67**, 026106 (2003); A.M.C. Souza and C. Tsallis. *Phys. Lett. A* **319**, 273 (2003).
- [46] G. Wilk e Z. Włodarczyk, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2770 (2000).
- [47] Para a bibliografia completa veja <http://tsallis.cat.cbpf.br/biblio.htm>
- [48] A. Cho, *Science* **297**, 1269 (2002); A. Plastino, *Science* **300**, 250 (2003); V. Latora, A. Rapisarda e A. Robledo, *Science* **300**, 250 (2003).
- [49] *Nonextensive Entropy: Interdisciplinary Applications*, eds. M. Gell-Mann e C. Tsallis (Oxford University Press, New York, 2004).
- [50] C. Tsallis, A.R. Plastino e W.-M. Zheng, *Chaos, Solitons and Fractals* **8**, 885 (1997).
- [51] P. Grassberger e M. Scheunert, *J. Stat. Phys.* **26** 697 (1981), T. Schneider, A. Politi e D. Wurtz, *Z. Phys. B* **66** 469 (1987), G. Anania e A. Politi, *Europhys. Lett.* **7** 119 (1988) e H. Hata, T. Horita e H. Mori, *Progr. Theor. Phys.* **82** 897 (1989).
- [52] F. Baldovin em *Nonextensive Entropy: Interdisciplinary Applications*, eds. M. Gell-Mann e C. Tsallis (Oxford University Press, New York, 2004).

- [53] G.F. Anãnos, F. Baldovin e C. Tsallis. *Anomalous sensitivity to initial conditions and entropy production in standard maps: A nonextensive approach*, trabalho em andamento.
- [54] C. Tsallis, E.P. Borges e F. Baldovin, *Physica A* **305**, 1 (2002).
- [55] V. Latora e M. Baranger, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 520 (1999).
- [56] F. Baldovin, C. Tsallis e B. Schulze, *Physica A* **320**, 184 (2003).
- [57] F. Baldovin, *Physica A* **305**, 124 (2002).
- [58] F. Baldovin, L.G. Moyano e C. Tsallis, trabalho submetido [cond-mat/0402635].
- [59] V. Latora, A. Rapisarda e C. Tsallis, *Phys. Rev. E* **64**, 056134 (2001).
- [60] L.G. Moyano, F. Baldovin, C. Tsallis, trabalho submetido [cond-mat/0305091].
- [61] C. Tsallis, A. Rapisarda, V. Latora e F. Baldovin, em *Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long-Range Interactions*, eds T. Dauxois, S. Ruffo, E. Arimondo e M. Wilkens *Lecture Notes in Physics* **602**, 140 (Springer, Berlin, 2002).
- [62] A. Robledo, cond-mat/0307285.
- [63] F. Baldovin, L.G. Moyano, A.P. Majtey, A. Robledo e C. Tsallis, *Physica A*, in press (2004) [cond-mat/0312407].
- [64] F. Baldovin, E. Brigatti e C. Tsallis, *Phys. Lett. A* **320**, 254 (2004).
- [65] F. Baldovin, *Physica A*, in press (2004) [cond-mat/0402636].
- [66] F. Baldovin, em *Tendências da Física Estatística no Brasil*, ed. T. Tomé (Editora Livraria da Física, São Paulo, 2003).
- [67] P. Coullet e C. Tresser, *C.R. Acad. Sci. Paris* **287**, 577 (1978); Coullet P., Eckmann J.P. e Landford O.E., *Commun. Math. Phys.* **76**, 211 (1980).

- [68] Feigenbaum M., J. Stat. Phys. **19**, 25 (1978); **21** 669 (1979)
- [69] U.M.S. Costa, M.L. Lyra, A.R. Plastino e C. Tsallis, Phys. Rev. E **56**, 245 (1997).
- [70] M.L. Lyra e C. Tsallis, Phys. Rev. Lett. **80**, 53 (1998).
- [71] V. Latora, M. Baranger, A. Rapisarda e C. Tsallis, Phys. Lett. A **273**, 97 (2000).
- [72] F.A.B.F. de Moura, U. Tirnakli e M.L. Lyra, Phys. Rev. E **62**, 6361 (2000).
- [73] E.P. Borges, C. Tsallis, G.F.J. Añanos and P.M.C. Oliveira, Phys. Rev. Lett. **89**, 254103 (2002).
- [74] A. Robledo, para aparecer num volume especial de Physica D do título *Anomalous Distributions, Nonlinear Dynamics and Nonextensivity*, cds. H.L. Swinney e C. Tsallis (2004), em preparação [cond-mat/0202095].
- [75] B. Hu e J. Rudnick, Phys. Rev. Lett. **48**, 1645 (1982).
- [76] M. Buiatti, P. Grigolini e A. Montagnini, Phys. Rev. Lett. **82**, 3383 (1999).
- [77] P. Gaspard e X.J. Wang, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, **85**, 4591 (1988).
- [78] A.M. Ozorio de Almeida, *Sistemas Hamiltonianos: Caos E Quantização* (Unicamp, Campinas, 1991).
- [79] G.M. Zaslavsky, R.Z. Sagdeev, D.A. Usikov e A.A. Chernikov, *Weak chaos and quasi-regular patterns* (Cambridge University Press, Cambridge 1991).
- [80] G.M. Zaslavsky, Phys. Rep. **371**, 461 (2002).
- [81] G.M. Zaslavsky e B.A. Niyazov, Phys. Rep. **283**, 73 (1997).
- [82] R.S. Mackay, J.D. Meiss e I.C. Percival, Physica D **13**, 55 (1984).
- [83] B.V. Chirikov Phys. Rep. **52**, 263 (1979).
- [84] C. Tsallis, G. Bemski, e R.S. Mendes, Phys. Lett. A **257**, 93 (1999).

- [85] F.D. Nobre e C. Tsallis, *Phys. Rev. E* **68**, 036115 (2003).
- [86] E.P. Borges, C. Tsallis, A. Giansanti e D. Moroni, em *Tendências da Física Estatística no Brasil*, ed. T. Tomé (Editora Livraria da Física, São Paulo, 2003).
- [87] G. Parisi, *Physica A* **280**, 115 (2000).
- [88] P.G. De Benedetti e F.H. Stillinger, *Nature* **410**, 267 (2001).
- [89] G. Benettin, L. Galgani, A. Giorgilli e J.M. Strelcyn, *Meccanica* **15**, 21 (1980); veja também [9].
- [90] F. Baldovin e C. Tsallis, trabalho em andamento.
- [91] A. Kruger, *Computer Physics Communications*, **98**, 224 (1996).
- [92] E. Brigatti e C. Tsallis, trabalho não publicado.
- [93] K. Huang, *Statistical Mechanics* (J. Wiley and Sons, New York, 1987), p. 90-91 [“We mentioned the ergodic theorem in Section 3.4, but did not use it as a basis for the microcanonical ensemble, even though, on the surface, it seems to be the justification we need. The reason is that existing proofs of the theorem all share (...) an avoidance of dynamics. For this reason, they cannot provide the true relaxation time for a system to reach local equilibrium (typically about 10^{-15} s for real systems), but have a characteristic time scale of the order of the Poincaré cycle. For this reason, the ergodic theorem has so far been an interesting mathematical exercise irrelevant to physics.”].
- [94] L. Tisza, *Generalized Thermodynamics*, MIT Press (1966); P.T. Landsberg, *Thermodynamics and Statistical Mechanics*, Dover (1991).
- [95] F. Neri, *Lie algebras and canonical integration*, Department of Physics, University of Maryland, preprint (1988); H. Yoshida, *Phys. Lett. A* **150**, 262 (1990).

- [96] *Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long-Range Interactions*, eds T. Dauxois, S. Ruffo, E. Arimondo e M. Wilkens Lecture Notes in Physics **602**, 140 (Springer, Berlin, 2002).
- [97] T. Dauxois, V. Latora, A. Rapisarda, S. Ruffo e A. Torcini, em *Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long-Range Interactions*, eds T. Dauxois, S. Ruffo, E. Arimondo e M. Wilkens Lecture Notes in Physics **602**, 140 (Springer, Berlin, 2002).
- [98] A. Bonasera, V. Latora e A. Rapisarda, Phys. Rev. Lett. **75**, 3434 (1995).
- [99] L. Milanovic, H.A.Posch e W. Thirring, Phys. Rev. E **57**, 2763 (1998).
- [100] H. Koyama e T. Konishi, Phys. Lett. A **279**, 226 (2001); Y. Sota, O. Iguchi, M. Morikawa, T. Tatekawa e K. Maeda, Phys. Rev. E **64**, 056133 (2001).
- [101] M. Antoni e A. Torcini, Phys. Rev. E **57**, R6233 (1998); A. Torcini e M. Antoni, Phys. Rev. E **59**, 2746 (1999).
- [102] M. Antoni e S.Ruffo, Phys. Rev. E **52**, 2361 (1995).
- [103] V. Latora, A. Rapisarda e S. Ruffo, Phys. Rev. Lett. **80**, 692 (1998); Physica D **131**, 38 (1999); Progr. Theor. Phys. Suppl. **139**, 204 (2000).
- [104] V. Latora, A. Rapisarda e S. Ruffo, Phys. Rev. Lett. **83**, 2104 (1999); Physica A **280**, 81 (2000).
- [105] V. Latora e A. Rapisarda, Nucl. Phys. A **681**, 331c (2001).
- [106] C. Anteneodo e C. Tsallis, Phys. Rev. Lett. **80**, 5313 (1998).
- [107] F. Tamarit e C. Anteneodo, Phys. Rev. Lett. **84**, 208 (2000).
- [108] A. Campa, A. Giansanti e D. Moroni, Phys. Rev. E **62**, 303 (2000); Physica A **305**, 137 (2002).
- [109] B.J.C. Cabral e C. Tsallis, Phys. Rev. E **66**, 065101(R) (2002).

- [110] M.A. Montemurro, F. Tamarit e C. Anteneodo, Phys. Rev. E **67**, 031106 (2003).
- [111] A. Pluchino, V. Latora e A. Rapisarda, para aparecer num volume especial de Physica D do título *Anomalous Distributions, Nonlinear Dynamics and Nonextensivity*, eds. H.L. Swinney e C. Tsallis (2004), em preparação [cond-mat/0303081].
- [112] A. Pluchino, V. Latora e A. Rapisarda, cond-mat/0306374.
- [113] M. Kac, G. Uhlenbeck e P.C. Hemmer, J. Math. Phys. **4**, 216 (1963).
- [114] D. Lynden-Bell, Physica A **263**, 293 (1999).
- [115] D.H.E. Gross, *Microcanonical thermodynamics: Phase transitions in Small systems* Lectures Notes in Physics **66**, World scientific, Singapore (2001).
- [116] M. D'Agostino et al., Phys. Lett. B **473**, 219 (2000).
- [117] P. Chomaz, em *Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long-Range Interactions*, eds T. Dauxois, S. Ruffo, E. Arimondo e M. Wilkens Lecture Notes in Physics **602**, 140 (Springer, Berlin, 2002).
- [118] M. Schmidt, R. Kusche, T. Hippler, J. Donges e W. Kronmueller, Phys. Rev. Lett. **86**, 1191 (2001).
- [119] J. Klafter e G. Zumofen, Phys. Rev. E **49**, 4873 (1994).
- [120] A. Kudrolli e J. Henry, Phys. Rev. E **62**, R1489 (2000); Y-H. Taguchi e H. Takayasu. Europhys. Lett. **30**, 499 (1995).
- [121] A. Coniglio, Physica A **306**, 76 (2002).
- [122] M.Y. Choi e J. Choi, Phys. Rev. Lett. **91**, 124101 (2003); Y.Y. Yamaguchi, J. Barré, F. Bouchet, T. Dauxois e S. Ruffo, Physica A em impressão (2004), [cond-mat/0312480]; C. Anteneodo e R. Vallejos, Physica A em impressão (2004), [cond-mat/0401195].

- [123] V. Latora, A. Rapisarda e C. Tsallis, *Physica A* **305**, 129 (2002).
- [124] N.S.Krylov *Works on the Foundations of Statistical Physics*, translated by A.B. Migdal, Ya. G. Sinai e Yu. L. Zeceman, Princeton University Press (1979); *Nature* **153**, 709 (1944).
- [125] S. Abe, e N. Suzuki, *Phys. Rev. E* **67**, 016106 (2003).
- [126] E.P. Borges, e C. Tsallis, *Physica A* **305**, 148 (2002).
- [127] A. Robledo, comunicação ao congresso *International Workshop on Trends and Perspectives on Extensive and Non-Extensive Statistical Mechanics (q-60)*, Angra dos Reis, Brazil, 17-21/11/2003 [cond-mat/0401405].
- [128] J.P. Bouchaud, L.F. Cugliandolo, J. Kurchan e M. Mezard, in *Spin Glasses and Random Fields*, A.P. Young, editor (World Scientific, Singapore, 1998).

“Sobre os fundamentos dinâmicos da Mecânica Estatística Não-Extensiva”

Fulvio Baldovin

Tese apresentada no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, fazendo parte da Banca examinadora os seguintes Professores:

Constantino Tsallis – Presidente

Francisco Castilho Alcaraz – USP de São Carlos

Sílvio Roberto de Azevedo Salinas – USP

Raul Oscar Vallejos – CBPF

Maria Eulália Vares - CBPF

Rio de Janeiro, 21 de março de 2004