

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Tese de doutorado

**Grandes desvios e independência
assintótica em sistemas fortemente
correlacionados**

Max Jáuregui

Rio de Janeiro, Setembro de 2015

Orientador: Constantino Tsallis

À minha família
e
ao meu amor, Gabriela.

Resumo. Analisamos dois modelos probabilistas que envolvem variáveis aleatórias fortemente correlacionadas e que têm distribuições q -gaussianas como distribuições limite. O primeiro modelo baseia-se em um arranjo triangular de variáveis aleatórias onde a distribuição conjunta de cada linha é basicamente uma discretização de uma distribuição q -gaussiana que foi introduzida por Rodríguez *et al* (2008). Para este modelo mostramos que quaisquer $m < n$ variáveis aleatórias da n -ésima linha, a qual contém n variáveis, do arranjo triangular tornam-se, paradoxalmente, independentes quando $n \rightarrow \infty$. Além disso, mencionamos uma possível verificação experimental deste resultado no contexto de uma transição de fase de segunda ordem. O segundo modelo lida com uma sequência de variáveis aleatórias, onde consideramos uma distribuição conjunta que foi introduzida por Hanel *et al* (2009). Mostramos que a sequência de variáveis aleatórias não cumpre a lei dos grandes números. Mais especificamente, a probabilidade de grandes desvios converge a um limite não-nulo em geral. Encontramos cotas para a diferença entre esta probabilidade e seu limite e mostramos que estas cotas aproximam-se de zero como leis de potência compatíveis com q -exponenciais. Nossos resultados para ambos os modelos ilustram que sistemas fortemente correlacionados podem apresentar comportamentos altamente não intuitivos. Além do estudo de modelos probabilísticos, sugerimos uma tentativa de aplicar o ensemble canônico da mecânica estatística não extensiva a um modelo de n rotores clássicos bidimensionais interagentes, onde o alcance da interação é modulado por um parâmetro real $\alpha \geq 0$.

Palavras chave. Sistemas fortemente correlacionados, independência assintótica, grandes desvios, distribuição q -gaussiana, mecânica estatística não extensiva, entropia S_q .

Abstract. We analyse two probabilistic models that involve strongly correlated random variables which have q -Gaussian distributions as limiting distributions. The first model is based on a triangular array of random variables where the joint distribution of each line is basically a discretization of a q -Gaussian distribution which was introduced by Rodriguez *et al* (2008). For this model we show that any $m < n$ random variables of the n th row, which contains n variables, of the triangular array turn out to be, paradoxically, independent when $n \rightarrow \infty$. Moreover, we mention a possible experimental verification of this result in the context of a second-order phase transition. The second model deals with a sequence of random variables, where we consider a joint distribution which was introduced by Hanel *et al* (2009). We show that the sequence of random variables does not obey the law of large numbers. More specifically, the probability of large deviations converges to a usually non-null limit. We find bounds to the difference between this probability and its limit and we show that these bounds approach zero like power-laws which are compatible with q -exponentials. Our results for both models illustrate that strongly correlated systems can show non-intuitive behavior. In addition to the study of probabilistic models, we suggest a possible application of the canonical ensemble of nonextensive statistical mechanics to a model that consists of n interacting localized bidimensional classical rotors, where the range of interaction is modulated by a real parameter $\alpha \geq 0$.

Keywords. Strongly correlated systems, asymptotic independence, large deviations, q -Gaussian distribution, nonextensive statistical mechanics, S_q entropy.

Agradecimentos

Em primeiro lugar, agradeço a minha família que, mesmo estando longe, apoiou-me bastante durante estes $2 + 4 + \epsilon$ anos no Brasil. Além disso, é graças a eles que eu estou aqui. Eu sei que, ainda que sejam quase três anos que não nos vemos, sempre estou presente nos seus pensamentos, assim como eu os tenho presentes nos meus.

Agradeço mais uma vez ao Prof. Constantino Tsallis pelo apreço e pela confiança que tem em mim.

Agradeço aos professores com os quais fiz matérias no CBPF durante o doutorado: José Helayël, Maria Eulália Vares e Nelson Pinto Neto.

Agradeço aos meus amigos ex-moradores da Rua Santa Clara, ex-“meninos doutor”, ex-“Filhos da Caixa Preta”: Jefferson (Kelly, Kali e Lilith), Esley e Rodrigo.

Agradeço aos Profs. Ervin Lenzi, Rênio Mendes e Roseli Wedemann pela amizade e pelo apoio que me deram em alguns momentos. Aproveito para agradecer ao pessoal de Maringá: Fernando, Haroldo e Angel.

Agradeço aos meus amigos e companheiros de moradia: Henrique, Leonardo Ospedal e Marília.

Agradeço aos meus amigos: Ana Paula, Bruno, Carlos, Cynthia, Edward, Enrique, Erich, Erick, Felipe Ferreira, Felipe Tolentino, Gabriela Casas, Grecia, Guilherme, Ivana, Leonardo Cirto, Lucho, Luciana, Luisa, Martha, Maurício, Michelle, Zochil.

Agradeço ao Célio, Fábio, à Denise e aos Profs. Sebastião Alves e Sérgio Duarte pela criação e implementação do auxílio alimentação, que me foi bastante útil nos meses finais do meu doutorado.

Agradeço a Almério, Bethe, Cláudia, Gabrielle e Thamires por estarem sempre dispostos a ajudar.

Agradeço a Edileuza e Rosa da biblioteca por serem sempre muito atenciosas.

Agradeço a Bete e Ricardo por se mostrarem sempre eficientes.

Agradeço ao CBPF, CNPq, INCT-SC e a Faperj pelo apoio financeiro.

Não tem como fechar esta lista de agradecimentos sem agradecer ao meu amor, Gabriela Cerqueira, por todo o carinho e ajuda que me tem dado. Sem dúvida ela contribuiu bastante para a elaboração desta tese. Aproveito para agradecer também ao senhor Valter e à senhora Célia, assim como às famílias Gomes e Cerqueira por terem-me acolhido da melhor forma.

Conteúdo

Introdução	1
1 Independência assintótica em sistemas fortemente correlacionados	5
1.1 Revisão de funções generalizadas	5
1.2 Generalização do teorema central do limite	7
1.3 Modelo probabilístico	11
1.4 Comportamento limite de distribuições	15
1.4.1 Caso $q < 1$	16
1.4.2 Caso $q \geq 1$	17
1.5 Conclusões	19
2 Breve introdução aos grandes desvios	21
2.1 Noção de grande desvio	21
2.2 Princípios de grandes desvios	24
2.3 Grandes desvios em sistemas fortemente correlacionados	28
3 Convergência da probabilidade de grandes desvios em sistemas fortemente correlacionados	31
3.1 Modelo probabilístico	31
3.2 Interpretação das variáveis aleatórias	32
3.3 A lei dos grandes números não se cumpre	34
3.4 Expressões assintóticas	37
3.4.1 Caso $x = 0$	38
3.4.2 Caso $\alpha = 1$	40
3.4.3 Caso $\alpha = 2$	41
3.4.4 Caso α inteiro	44
3.5 Conclusões	47
4 Mecânica estatística não extensiva	49
4.1 A entropia S_q	49
4.2 Extremização da entropia	55
4.3 Generalização do conceito de energia interna	56
4.4 O ensemble canônico da mecânica estatística não extensiva	59
4.4.1 Relações para a energia interna	60
4.4.2 Relação entre os ensembles canônicos da mecânica estatística não extensiva e da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs	63
4.5 O modelo α -XY	64

5 Conclusões e comentários finais

69

Introdução

A mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs (BG) é um dos maiores sucessos da física contemporânea. Ela consegue explicar as propriedades termodinâmicas de uma grande variedade de sistemas físicos no equilíbrio termodinâmico partindo de modelos microscópicos. Estes sistemas usualmente são ergódicos e apresentam interações de curto alcance ou correlações fracas entre seus componentes.

Na teoria de BG, a conexão entre os mundos microscópico e macroscópico é feita por meio da entropia de BG (Boltzmann, Gibbs, von Neumann e Shannon). A otimização desta entropia com vínculos apropriados gera distribuições exponenciais e Gaussianas. Desde um ponto de vista matemático, estas distribuições estão intimamente associadas a dois tipos de resultados importantes em probabilidade, que são o teorema central do limite e os princípios de grandes desvios. Desta maneira, pode-se dizer que estes resultados de probabilidade formam a base matemática da mecânica estatística de BG [1, 2].

O teorema central do limite diz basicamente que uma sequência de variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas dá origem a distribuições gaussianas como distribuições limite. Além disso, o teorema central do limite lida com desvios da ordem do desvio padrão, os quais as vezes são chamados de desvios moderados [3, 4]. Porém, em muitas ocasiões resulta necessário estimar a probabilidade de grandes desvios, para os quais o teorema central do limite não dá boas estimativas. O conjunto de ferramentas para encontrar o comportamento assintótico da probabilidade de grandes desvios é chamada comumente de teoria de grandes desvios. Um dos objetivos da teoria de grandes desvios é dar condições suficientes (por exemplo, teoremas de Cramér-Chernoff e Gärtner-Ellis) para que uma sequência μ_n de distribuições de probabilidade satisfaça um princípio de grandes desvios, o qual diz basicamente que o comportamento assintótico de μ_n é exponencial. Conceitos como a entropia relativa de BG (ou divergência de Kullback-Leibler) e a transformada de Fenchel-Legendre aparecem naturalmente em teoria de grandes desvios. Por outro lado, estes conceitos aparecem também naturalmente em termodinâmica e na mecânica estatística de BG. Isto é um forte indicativo de que a teoria de grandes desvios é a linguagem matemática da mecânica estatística de BG [2, 5, 6].

Em 1988 foi dado o primeiro passo na criação de uma nova teoria da mecânica estatística, a qual é conhecida atualmente pelo nome de mecânica estatística não extensiva [7, 8]. Esta teoria está baseada em uma generalização da entropia de BG que é usualmente denotada pelo símbolo S_q , onde q é um parâmetro real e $S_1 =$ entropia de BG. Atualmente existe uma grande comunidade de cientistas trabalhando

com a mecânica estatística não extensiva ou ajudando no seu desenvolvimento.¹

A entropia S_q para $q \neq 1$ tem todas as principais propriedades da entropia S_1 com exceção da aditividade. Em palavras simples, diz-se que uma entropia é *aditiva* quando, dado um sistema composto de duas partes independentes, a entropia do sistema é igual à soma das entropias das partes. Deve-se ressaltar que a não-aditividade da entropia S_q para $q \neq 1$ não implica que ela não possa ser utilizada para descrever fenômenos termodinâmicos. Muito pelo contrário, graças a esta propriedade é possível que a entropia S_q seja extensiva para um determinado sistema (que, tipicamente, apresenta fortes correlações) com um valor de $q \neq 1$. A *extensividade* da entropia, ou seja, o fato da entropia do sistema crescer linearmente com o número de componentes do sistema quando este é muito grande, é um requerimento da termodinâmica [9].

A otimização da entropia S_q com vínculos apropriados dá origem a distribuições exponenciais generalizadas e gaussianas generalizadas, que se comportam assintoticamente como leis de potência quando $q \neq 1$. Estas distribuições são chamadas de distribuições q -exponenciais e q -gaussianas respectivamente. Ambas estas distribuições aparecem em um grande número de sistemas naturais, artificiais e sociais; por exemplo, em sistemas clássicos hamiltonianos que apresentam interações de longo alcance [10, 11, 12, 13], átomos frios em redes óticas dissipativas [14, 15], plasmas empoeirados [16], no estudo do movimento sobreamortecido de partículas interagentes [17, 18, 19], em física de altas energias [20, 21, 22], em redes de escala livre [23, 24, 25] e em biologia [26].

A aparição frequente de distribuições q -gaussianas com $q \neq 1$ sugere a formulação de uma versão generalizada do teorema central do limite. Umarov *et al* [27] atingiram este objetivo introduzindo o conceito de q -independência, que é um tipo especial de dependência. O teorema central do limite generalizado diz basicamente que variáveis aleatórias q -independentes e identicamente distribuídas, com determinados valor esperado e variância finitos, dão origem a distribuições q -gaussianas como distribuições limite.

A prova da generalização do teorema central do limite dada por Umarov *et al* [27] está baseada no uso de uma generalização não linear da transformada de Fourier, usualmente conhecida pelo nome de q -transformada de Fourier. Hilhorst [28] (veja também [29, 30, 31]) provou por meio de contraexemplos que a q -transformada de Fourier não é invertível. Isto criou um problema na prova da generalização do teorema central do limite que está aberto até hoje. As referências [29, 30, 31] (ver também [32, 33, 34, 35, 36]) dão uma solução parcial a este problema, pois mostram algumas situações nas quais é possível se determinar uma distribuição a partir da sua q -transformada de Fourier. Além do problema técnico da invertibilidade da q -transformada de Fourier, a definição de q -independência é um tipo de correlação muito específico e é muito difícil de ser verificado em sistemas concretos. Por outro lado, alguns modelos probabilísticos (ver, por exemplo, [37, 38, 39, 40]) indicam que

¹Visite o site <http://tsallis.cat.cbpf.br/biblio.htm> para ter acesso a uma bibliografia constantemente atualizada.

as condições da generalização do teorema central do limite enunciado por Umarov *et al* são suficientes mas não necessárias.

Recentemente, houve interesse por se criar uma teoria de grandes desvios compatível com a mecânica estatística não extensiva. Os primeiros trabalhos nesta direção analisaram numericamente o decaimento da probabilidade de grandes desvios em um modelo probabilístico em particular que envolvia variáveis aleatórias fortemente correlacionadas [41, 42]. Estes trabalhos mostraram um comportamento assintótico do tipo q -exponencial para a probabilidade de grandes desvios. Isto sugere que deve ser possível generalizar resultados de grandes desvios envolvendo decaimento do tipo q -exponencial (lei de potência), onde a teoria de grandes desvios não funciona ou dá resultados triviais. A generalização de resultados principais de grandes desvios, como o teorema de Gärtner-Ellis, para sistemas fortemente correlacionados ainda se encontra em aberto. Por outro lado, Naudts e Suyari [43] generalizaram uma parte do teorema de Cramér-Chernoff utilizando a função q -exponencial no lugar da exponencial. Porém, seus resultados se aplicam a seqüências de variáveis independentes.

Pelos motivos mencionados nos parágrafos anteriores, o objetivo principal desta tese é estudarmos questões relacionadas a q -independência e grandes desvios em modelos probabilísticos que envolvem variáveis aleatórias fortemente correlacionadas e que apresentam distribuições q -gaussianas como distribuições limite. Por outro lado, também estamos interessados no formalismo do ensemble canônico da mecânica estatística não extensiva e sua possível aplicação a um sistema clássico hamiltoniano que apresenta interações de longo alcance. Este tópico também é muito importante, pois até a presente data não existe na literatura nenhum cálculo de, por exemplo, um calor específico, utilizando o formalismo a mecânica estatística não extensiva.

No capítulo 1 consideramos um arranjo triangular de variáveis aleatórias discretas, permutáveis e fortemente correlacionadas, onde a n -ésima linha do arranjo consta de n variáveis aleatórias. Estudamos o comportamento assintótico da distribuição conjunta de m -variáveis aleatórias da n -ésima linha do arranjo quando $n \rightarrow \infty$ e mostramos que, se $m < n$ é fixo, o conjunto de m variáveis aleatórias se torna paradoxalmente independente quando $n \rightarrow \infty$. No entanto, se consideramos um número de variáveis aleatórias que cresce com n , este fenômeno não acontece [44]. Ainda está pendente verificarmos se este comportamento paradoxal acontece em algum sistema concreto. Por enquanto, só sugerimos um possível experimento que envolve o estudo de um material que apresenta uma transição de fase de segunda ordem.

O capítulo 1 contém também as definições das funções q -logaritmo, q -exponencial e da distribuição q -gaussiana. Além disso, fazemos uma breve discussão sobre a generalização do teorema central do limite de Umarov *et al* [27].

O capítulo 2 contém uma introdução à teoria de grandes desvios. Aqui damos a definição do que se conhece como princípio de grandes desvios e enunciamos os teoremas de Cramér-Chernoff e Gärtner-Ellis. O estilo de escrita deste capítulo e da maior parte da tese tenta ser rigoroso sem usar uma linguagem pedante. Desta maneira, cálculos e demonstrações são feitos com mais cuidado do que normalmente

se encontra em textos de física, mas termos técnicos são omitidos quando não são necessários.

No capítulo 2 também apresentamos os resultados obtidos na referência [42] sobre o estudo do decaimento da probabilidade de grandes desvios em um modelo que envolve variáveis aleatórias fortemente correlacionadas.

No capítulo 3 introduzimos um outro modelo probabilístico que envolve uma sequência de variáveis aleatórias discretas, permutáveis e fortemente correlacionadas e que apresenta distribuições q -gaussianas como distribuições limite. Mostramos que a probabilidade de grandes desvios converge a um limite em geral não nulo e, por conseguinte, a lei dos grandes números não se cumpre neste modelo. Analisamos a rapidez de convergência da probabilidade de grandes desvios e mostramos que, em geral, esta probabilidade converge a seu limite não mais rápido do que uma q -exponencial [45].

No capítulo 4 apresentamos uma versão do ensemble canônico da mecânica estatística não extensiva com vistas a uma aplicação em sistemas clássicos hamiltonianos. Aqui definimos a entropia S_q de uma distribuição de probabilidade absolutamente contínua e provamos, entre outras coisas, que ela está bem definida quando $q \neq 1$. Deixando o rigor de lado, além das relações termodinâmicas encontradas na literatura sobre mecânica estatística não extensiva [46], apresentamos um par de relações novas para obter a energia interna. Mostramos também uma relação entre as funções de partição da mecânica estatística de BG e da mecânica estatística não extensiva.

O capítulo 4 também contém um trabalho ainda não finalizado que consiste na aplicação do ensemble canônico da mecânica estatística não extensiva a um sistema de n rotores clássicos bidimensionais localizados em uma rede d -dimensional. Este modelo é conhecido pelo nome de modelo α -XY, onde o parâmetro real $\alpha > 0$ caracteriza o alcance das interações entre os rotores [47]. A energia livre deste modelo no caso unidimensional foi calculada analiticamente utilizando a mecânica estatística de BG, mesmo no caso $\alpha \in [0, 1)$ (interações de longo alcance) [48, 49, 50]. Por outro lado, quando $\alpha \in [0, 1)$, simulações computacionais mostraram distribuições de momentos angulares similares a q -gaussianas [11], o qual sugeriria que o sistema deveria ser descrito pela mecânica estatística não extensiva. Esta aparente contradição pode ser solucionada utilizando o fato de que as simulações computacionais também mostram que o modelo α -XY apresenta estados metaestáveis cujas durações crescem com o número de rotores do sistema [11]. Logo, no limite termodinâmico, o estado de equilíbrio será atingido em um tempo extremamente longo. Acreditamos que a mecânica estatística não extensiva deve descrever o estado metaestável de maior duração do modelo α -XY.

Podemos finalizar esta introdução dizendo que esta tese vai lidar com sistemas fortemente correlacionados (modelos probabilísticos e sistemas hamiltonianos), os quais podem apresentar comportamentos não intuitivos.

Capítulo 1

Independência assintótica em sistemas fortemente correlacionados

Neste capítulo vamos ver que sistemas fortemente correlacionados podem ter propriedades não intuitivas. Utilizando um modelo probabilístico simples, introduzido por Rodríguez *et al* [37], mostramos que uma parte de um sistema fortemente correlacionado pode apresentar, paradoxalmente, independência assintótica [44]. A leitura deste capítulo requer do conhecimento das definições das funções generalizadas q -exponencial e q -logaritmo, assim como das distribuições q -gaussianas. Tais definições são apresentadas na seção 1.1 (ver [8] para mais detalhes). Para fazermos a leitura autossuficiente, alguns conceitos e resultados básicos de teoria de probabilidades são mencionados durante o transcurso da leitura.

1.1 Revisão de funções generalizadas

A entropia S_q , na qual a mecânica estatística não extensiva está baseada, pode ser escrita de forma semelhante a entropia de Boltzmann-Gibbs utilizando a função q -logaritmo.¹ Dado $q \in \mathbb{R}$, define-se o q -logaritmo de $x > 0$ por (ver figura 1.1)

$$\ln_q x = \int_1^x \frac{dy}{y^q} = \begin{cases} \frac{x^{1-q} - 1}{1-q} & \text{se } q \neq 1 \\ \ln x & \text{se } q = 1. \end{cases} \quad (1.1)$$

Vemos imediatamente de (1.1) que \ln_q é uma função contínua e monótona crescente no intervalo $(0, \infty)$. Por conseguinte, ela possui uma função inversa com as mesmas propriedades [51], a qual é chamada de q -exponencial, definida por (ver figura 1.1)

$$\exp_q x = \begin{cases} [1 + (1-q)x]^{1/(1-q)} & \text{se } q \neq 1 \\ e^x & \text{se } q = 1 \end{cases} \quad (1.2)$$

para todo $x \in \mathbb{R}$ tal que $1 + (1-q)x > 0$. A notação $e_q^x := \exp_q x$ será utilizada convenientemente. Veremos no capítulo 4 que a função q -exponencial aparece naturalmente no processo de extremização da entropia S_q .

¹A entropia S_q será definida no capítulo 4.

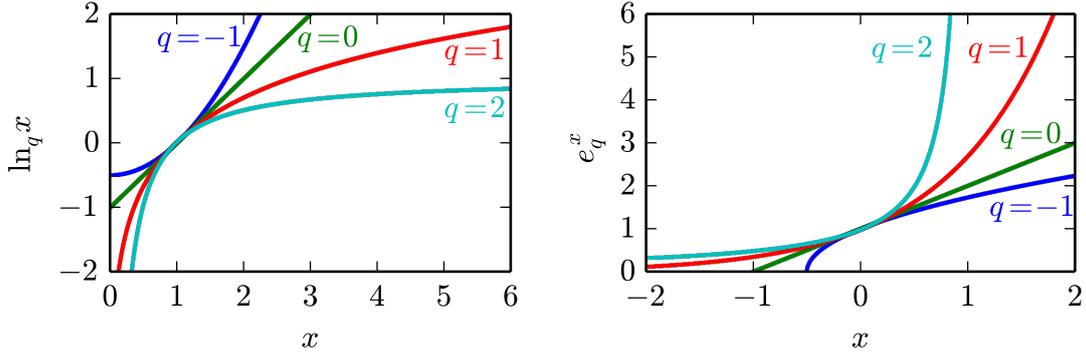


Figura 1.1: Gráficos das funções q -logaritmo e q -exponencial para diferentes valores de q .

Uma *distribuição de probabilidade* em \mathbb{R}^n é uma função μ que designa probabilidade a todo² $B \subset \mathbb{R}^n$. Quando existe uma função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow (0, \infty)$ tal que

$$\mu((-\infty, x_1] \times \cdots \times (-\infty, x_n]) = \int_{-\infty}^{x_1} dy_1 \cdots \int_{-\infty}^{x_d} f(y_1, \dots, y_n) dy_n \quad (1.3)$$

para quaisquer $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}$, diremos que μ é uma *distribuição (absolutamente) contínua* e que f é a *densidade* de μ .

Utilizando a função q -exponencial, definimos a densidade de uma *distribuição q -gaussiana* com parâmetros $q < 3$ e $\beta > 0$ por (ver figura 1.2)

$$g_{q,\beta}(x) = \begin{cases} \frac{\sqrt{\beta}}{N_q} e_q^{-\beta x^2} & \text{se } 1 - (1 - q)\beta x^2 > 0 \\ 0 & \text{se } 1 - (1 - q)\beta x^2 \leq 0, \end{cases} \quad (1.4)$$

onde N_q é uma constante de normalização, cuja expressão é a seguinte:

$$N_q = \begin{cases} \frac{2^{(3-q)/(1-q)}}{\sqrt{1-q}} B\left(\frac{2-q}{1-q}, \frac{2-q}{1-q}\right) & \text{se } q < 1 \\ \sqrt{\pi} & \text{se } q = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{q-1}} B\left(\frac{1}{2}, \frac{3-q}{2(q-1)}\right) & \text{se } 1 < q < 3. \end{cases} \quad (1.5)$$

Aqui B denota a função beta, definida por [54]

$$B(x, y) = \int_0^1 t^{x-1} (1-t)^{y-1} dt, \quad x, y > 0. \quad (1.6)$$

²Rigorosamente, B deve ser boreliano [52]; no entanto, subconjuntos de \mathbb{R}^d que não são borelianos não aparecem na prática [53]. Devido a isto, quando falemos de subconjuntos de \mathbb{R}^n , tacitamente nos estaremos referindo a borelianos de \mathbb{R}^n .

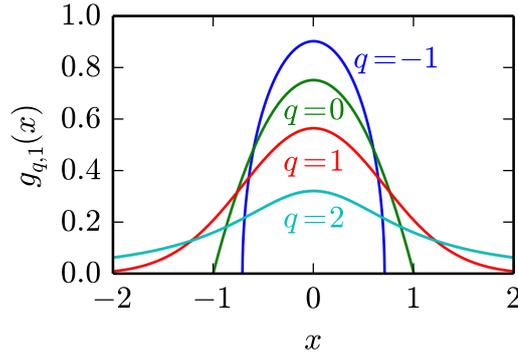


Figura 1.2: Gráfico da densidade da distribuição q -gaussiana para diferentes valores de q .

Vemos imediatamente de (1.4) que, se $q \geq 1$, $g_{q,\beta}(x) > 0$ para todo $x \in \mathbb{R}$. Se $q < 1$, tem-se que $g_{q,\beta}(x) > 0$ se e somente se $|x| < 1/\sqrt{\beta(1-q)}$. Diz-se então que a distribuição q -gaussiana tem suporte compacto³ quando $q < 1$.

1.2 Generalização do teorema central do limite

Nesta tese reservamos os símbolos \mathbf{P} e \mathbf{E} para denotar probabilidade e valor esperado respectivamente. Por exemplo, se X é uma variável aleatória, a probabilidade do evento $[X \in B]$ será denotada por $\mathbf{P}(X \in B)$.

Em geral, a distribuição de uma variável aleatória X é a distribuição em \mathbb{R} definida por $\mu(B) = \mathbf{P}(X \in B)$, $B \subset \mathbb{R}$. Se X é uma variável aleatória *discreta*, ou seja, que assume somente valores discretos, então, a distribuição de X fica completamente caracterizada pela sua *função de probabilidade* $p(x) = \mathbf{P}(X = x)$, $x \in \mathbb{R}$.

Se X é uma variável aleatória discreta com função de probabilidade p , então o *valor esperado* de X está definido por

$$\mathbf{E}X = \sum_{x:p(x)>0} xp(x) \quad (1.7)$$

desde que a série não dependa da ordem dos termos. Se Y tem densidade f , então tem-se que

$$\mathbf{E}Y = \int_{-\infty}^{\infty} yf(y) dy. \quad (1.8)$$

Se X tem valor esperado finito, a *variança* de X está definida por

$$\text{Var } X = \mathbf{E}(X - \mathbf{E}X)^2. \quad (1.9)$$

³Entenda-se por *suporte* de uma função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ao menor conjunto fechado (ver final da página 25) que contém o conjunto $[f \neq 0] := \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \neq 0\}$. Se este conjunto é limitado, então diz-se que a função f tem *suporte compacto* [55].

Define-se a *distribuição conjunta* das variáveis aleatórias X_1, \dots, X_n como a distribuição em \mathbb{R}^n definida por

$$\mu(B_1 \times \dots \times B_n) = \mathbf{P}(X_1 \in B_1, \dots, X_n \in B_n), \quad B_1, \dots, B_n \subset \mathbb{R}, \quad (1.10)$$

onde o evento $[X_1 \in B_1, \dots, X_n \in B_n]$ é a realização simultânea (interseção) dos eventos $[X_i \in B_i]$, $i = 1, \dots, n$.

Diz-se que X_1, X_2, \dots são variáveis aleatórias *independentes* se, para cada inteiro $n \geq 2$,

$$\mathbf{P}(X_1 \in B_1, \dots, X_n \in B_n) = \prod_{i=1}^n \mathbf{P}(X_i \in B_i), \quad B_1, \dots, B_n \subset \mathbb{R}. \quad (1.11)$$

O teorema mais importante da teoria de probabilidades, na sua versão mais clássica, é o seguinte [52]:

Teorema central do limite. *Sejam X_1, X_2, \dots variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas e seja $S_n = X_1 + \dots + X_n$. Se $0 < \text{Var } X_1 < \infty$, então*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P} \left(\frac{S_n - n\mathbf{E}X_1}{\sqrt{n \text{Var } X_1}} \leq x \right) = \int_{-\infty}^x \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-y^2/2} dy.$$

Vejamos uma aplicação do teorema central do limite ao caso concreto de efetuar 100 lançamentos sucessivos de uma moeda honesta. Neste caso, o teorema central do limite nos diz que é improvável ter um número total de caras menor do que 40 ou maior do que 60. Com efeito, definamos as variáveis aleatórias

$$X_i = \begin{cases} 1 & \text{se a moeda cai cara no } i\text{-ésimo lançamento} \\ 0 & \text{se a moeda cai coroa no } i\text{-ésimo lançamento.} \end{cases} \quad (1.12)$$

Como a moeda é honesta, temos que $\mathbf{E}X_i = 1/2$ e $\text{Var } X_i = 1/4$. Neste caso, se S_n é o número total de caras em n lançamentos, o teorema central do limite nos diz que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P} \left(a \frac{\sqrt{n}}{2} < S_n - \frac{n}{2} \leq b \frac{\sqrt{n}}{2} \right) = \int_a^b \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-y^2/2} dy, \quad (1.13)$$

para quaisquer $a, b \in [-\infty, \infty]$, $a \leq b$. Em particular, tomando $a = -2$ e $b = 2$, temos que $\mathbf{P}(40 < S_{100} \leq 60) \approx 0.9546$.

Além de aplicações na teoria de probabilidades e na estatística, o teorema central do limite é um dos ingredientes fundamentais da base matemática da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs [1]. Umarov et al. [27] propuseram uma generalização deste teorema que, em palavras simples, estabelece que as distribuições q -gaussianas com⁴ $q \in (1, 5/3)$ aparecem como distribuições limite quando se consideram variáveis aleatórias com um certo tipo de dependência, chamado de q -independência. A

⁴Este intervalo dos possíveis valores de q foi extraído diretamente do enunciado da generalização do teorema central do limite dada na referência [27].

motivação para se enunciar uma generalização do teorema central do limite foi tentar solidificar a base matemática da mecânica estatística não extensiva. Para dar mais detalhes sobre esta generalização, precisamos definir o que é q -independência, o qual, pela sua vez, requer de algumas definições prévias.

Seja X uma variável aleatória discreta com função de probabilidade p . Dado $q \in \mathbb{R}$, define-se a *função de probabilidade escolta* de ordem q de X por [56]

$$p^{(q)}(x) = \frac{[p(x)]^q}{\sum_{x:p(x)>0}[p(x)]^q}. \quad (1.14)$$

Utilizando esta nova função de probabilidade, define-se o q -valor esperado de X por

$$\mathbf{E}^{(q)} X = \sum_{x:p(x)>0} xp^{(q)}(x), \quad (1.15)$$

desde que a série não dependa do ordenamento dos termos. Em particular, se a série é absolutamente convergente ($\sum_{x:p(x)>0} |x|p^{(q)}(x) < \infty$), então $\mathbf{E}^{(q)} X$ existe e é finito. Neste caso, define-se a $(2q - 1)$ -variança de X por⁵

$$\text{Var}^{(2q-1)} X = \mathbf{E}^{(2q-1)}(X - \mathbf{E}^{(q)} X)^2. \quad (1.16)$$

Em geral, vamos dizer que $\mathbf{E}^{(q)} X^n$ é o n -ésimo q -momento de X .

Vejam alguns exemplos:

- a) Seja X uma variável aleatória discreta *distribuída uniformemente* no conjunto $\{x_1, \dots, x_n\}$, ou seja,

$$p(x_i) := \mathbf{P}(X = x_i) = \frac{1}{n}, \quad i = 1, \dots, n. \quad (1.17)$$

Logo, a função de probabilidade escolta de ordem q de X está dada por

$$p^{(q)}(x_i) = \frac{n^{-q}}{n \cdot n^{-q}} = p(x_i), \quad i = 1, \dots, n. \quad (1.18)$$

- b) Dado $s > 0$, seja N_s uma variável aleatória discreta com função de probabilidade

$$\mathbf{P}(N_s = n) = \frac{1}{\zeta(s)n^s}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (1.19)$$

onde

$$\zeta(t) := \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^t}, \quad t > 0, \quad (1.20)$$

⁵Ao parecer, existe um erro na definição da $(2q - 1)$ -variância na referência [27]. Aqui apresentamos uma definição alternativa tirada da prova da generalização do teorema central do limite dada na mesma referência.

é a *função zeta de Riemann*. Se $1 < s \leq 2$, então $\mathbf{E}N_s = \infty$. Com efeito,

$$\mathbf{E}N_s = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n}{\zeta(s)n^s} = \infty. \quad (1.21)$$

No entanto, fazendo uma conta similar, podemos mostrar que $\mathbf{E}^{(q)}N_s$ é finito quando $q > 2/s$.

- c) O k -ésimo q -momento da variável aleatória N_s definida no exemplo anterior está dado por

$$\mathbf{E}^{(q)}N_s^k = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} n^k [\zeta(s)n^s]^{-q}}{\sum_{n=1}^{\infty} [\zeta(s)n^s]^{-q}} \propto \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{sq-k}} \quad (1.22)$$

Logo, para que $\mathbf{E}^{(q)}N_s^k$ seja finito, deve-se ter $sq > k + 1$. Segue imediatamente daqui que a finitude de $\mathbf{E}^{(q)}N_s^k$ implica que $\mathbf{E}^{(q)}N_s, \dots, \mathbf{E}^{(q)}N_s^{k-1}$ são finitos. Por outro lado, se para um certo⁶ $k \in \mathbb{N}$ existe um certo valor de q tal que $\mathbf{E}^{(q_k)}N_s^k$, $q_k = kq - (k - 1)$, seja finito, então $\mathbf{E}^{(q_i)}N_s^i$ é finito para qualquer inteiro positivo $i \leq k$. Com efeito, suponhamos, por absurdo, que tenhamos $sq_k > k + 1$ e $sq_i \leq i + 1$ para algum inteiro positivo $i < k$. Logo,

$$\frac{i + 1 + (i - 1)s}{i} \geq sq > \frac{k + 1 + (k - 1)s}{k} \quad (1.23)$$

de onde obtemos que $s < 1$, o qual é uma contradição.

Mais duas definições são necessárias para definirmos o que é q -independência. A primeira é o chamado q -produto, definido de forma puramente formal por [57, 58]

$$a \otimes_q b = \begin{cases} (a^{1-q} + b^{1-q} - 1)^{1/(1-q)} & \text{se } q \neq 1 \\ ab & \text{se } q = 1. \end{cases} \quad (1.24)$$

Para definir o segundo conceito consideremos uma variável aleatória discreta X com função de probabilidade p . Dado $q \in [1, 2)$, definimos a q -transformada de Fourier de X por⁷ [27]

$$\varphi_X^{(q)}(t) = \sum_{x:p(x)>0} p(x)e_q^{-itx[p(x)]^{q-1}}, \quad t \in \mathbb{R}, \quad (1.25)$$

desde que a série não dependa da ordem dos termos.

Agora estamos preparados para o conceito de q -independência. Dado $q \in [1, 2)$, sejam X e Y variáveis aleatórias discretas com q -valor esperado finito e definamos $X_1 = X - \mathbf{E}^{(q)}X$ e $Y_1 = Y - \mathbf{E}^{(q)}Y$. Diz-se que X e Y são q -independentes se⁸ [27]

$$\varphi_{X_1+Y_1}^{(q)} = \varphi_{X_1}^{(q)} \otimes_q \varphi_{Y_1}^{(q)}. \quad (1.26)$$

⁶ \mathbb{N} denota o conjunto dos números naturais $1, 2, \dots$

⁷Dado $x \in \mathbb{R}$, define-se e_q^{ix} ($i = \sqrt{-1}$) como o valor principal (ver [59]) de $[1 + (1 - q)ix]^{1/(1-q)}$ [27].

⁸Na verdade existem três tipos de q -independência [27], mas aqui só mostramos um deles.

É conveniente ressaltar que se duas variáveis aleatórias discretas X e Y são independentes, então $\varphi_{X+Y}^{(1)} = \varphi_X^{(1)} \varphi_Y^{(1)}$ [53].

O conceito de q -independência pode ser estendido imediatamente para qualquer número finito de variáveis aleatórias. Se X_1, X_2, \dots são variáveis aleatórias discretas com q -valor esperado finito tais que, para cada inteiro $n \geq 2$, X_1, \dots, X_n são q -independentes, então vamos dizer que X_1, X_2, \dots são q -independentes.

Umarov *et al* [27] enunciaram a seguinte generalização do teorema central do limite: *Dado $q \in [1, 2)$, sejam X_1, X_2, \dots variáveis aleatórias discretas q -independentes com função de probabilidade comum p . Se $0 < \text{Var}^{(2q-1)} X_1 < \infty$, então existe uma variável aleatória Z com distribuição q' -gaussiana com parâmetros*

$$q' = \frac{3q-1}{1+q} \quad e \quad \beta = \left(\frac{3-q'}{4qN_{q'}^{2(q'-1)}} \right)^{1/(2-q')}, \quad (1.27)$$

com $N_{q'}$ definido segundo (1.5), tal que⁹ $\varphi_{Z_n}^{(q)} \rightarrow \varphi_Z^{(q')}$ quando $n \rightarrow \infty$, onde¹⁰

$$Z_n = \frac{\sum_{i=1}^n X_i - n\mathbf{E}^{(q)} X_1}{\{n \text{Var}^{(2q-1)} X_1 \sum_{x:p(x)>0} [p(x)]^{2q-1}\}^{1/2}}. \quad (1.28)$$

É relevante comentarmos que a q -transformada de Fourier de uma variável aleatória com distribuição q -gaussiana (com o mesmo parâmetro q) é igual à densidade de uma distribuição q'' -gaussiana com $q'' = (1+q)/(3-q)$ [27].¹¹ Esta é uma das propriedades mais relevantes da q -transformada de Fourier na prova da generalização do teorema central do limite dada na referência [27]. Por outro lado, Hilhorst [28] provou, por meio de contraexemplos, que a q -transformada de Fourier não é inversível. Por conseguinte, ainda não há prova de que a convergência $\varphi_{Z_n}^{(q)} \rightarrow \varphi_Z^{(q')}$ implique que Z_n converge em distribuição a Z . No entanto, as referências [29, 30, 31] mostram algumas situações nas quais é possível se determinar uma densidade a partir da sua q -transformada de Fourier. Estes argumentos poderiam ser utilizados para provar o resultado de convergência em distribuição.

1.3 Modelo probabilístico

Primeiro vamos dar uma definição prévia. Diz-se que as variáveis aleatórias X_1, \dots, X_n são *permutáveis* se sua distribuição conjunta permanece invariante

⁹Ao parecer, existe também um erro na definição de q -convergência na referência [27]. Devido a isto, aqui não usamos este conceito.

¹⁰O denominador de Z_n difere de $\{n \text{Var}^{(2q-1)} X_1 \sum_{x:p(x)>0} [p(x)]^{2q-1}\}^{1/(4-2q)}$, que é o denominador de Z_n segundo a referência [27]. Isto se deve a que, no nosso caso, estamos considerando variáveis aleatórias discretas.

¹¹Se X é uma variável aleatória que tem densidade f , a q -transformada de Fourier de X está definida por

$$\varphi_X^{(q)}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e_q^{-itx} [f(x)]^{q-1} dx, \quad t \in \mathbb{R}.$$

Se $n \geq 2$, devido as variáveis aleatórias $X_{q,n,1}, \dots, X_{q,n,n}$ serem permutáveis, temos que, dados $x_1, \dots, x_n \in \{0, 1\}$,

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(X_{q,n,1} = x_1, \dots, X_{q,n,n} = x_n) &= \binom{n}{x_1 + \dots + x_n}^{-1} \mathbf{P}(S_{q,n} = x_1 + \dots + x_n) \\ &= \frac{1}{Z_{q,n}} \binom{n}{x_1 + \dots + x_n}^{-1} e_q^{-x_{q,n,x_1+\dots+x_n}}. \end{aligned} \quad (1.33)$$

Vemos que o lado direito de (1.33) depende do valor da soma $x_2 + \dots + x_n$, mas não dos valores específicos de x_2, \dots, x_n . Também vemos facilmente que existem $\binom{n-1}{k}$ listas $(x_2, \dots, x_n) \in \{0, 1\}^{n-1}$ tais que $x_2 + \dots + x_n = k$. Escolhido um x_1 , estas listas dão o mesmo valor ao lado direito de (1.33). Portanto se somamos em x_2, \dots, x_n em (1.33), obtemos que

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(X_{q,n,1} = x_1) &= \frac{1}{Z_{q,n}} \sum_{k=0}^{n-1} \binom{n-1}{k} \binom{n}{k+x_1}^{-1} e_q^{-x_{q,n,k+x_1}} \\ &= \frac{1}{Z_{q,n}} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(k+x_1)!(n-k-x_1)!}{nk!(n-k-1)!} e_q^{-x_{q,n,k+x_1}}. \end{aligned} \quad (1.34)$$

Se $x_1 = 0$, então

$$\mathbf{P}(X_{q,n,1} = 0) = \frac{1}{Z_{q,n}} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{n-k}{n} e_q^{-x_{q,n,k}}. \quad (1.35)$$

Por outro lado, se $x_1 = 1$,

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(X_{q,n,1} = 1) &= \frac{1}{Z_{q,n}} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{k+1}{n} e_q^{-x_{q,n,k+1}} \\ &= \frac{1}{Z_{q,n}} \sum_{k=1}^n \frac{k}{n} e_q^{-x_{q,n,k}} \\ &= \frac{1}{Z_{q,n}} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{n-k}{n} e_q^{-x_{q,n,n-k}} \\ &= \mathbf{P}(X_{q,n,1} = 0), \end{aligned} \quad (1.36)$$

onde temos usado o fato de que $x_{q,n,n-k} = -x_{q,n,k}$, o qual segue diretamente de (1.31). Desta maneira, temos provado que as variáveis aleatórias $X_{q,n,1}, \dots, X_{q,n,n}$ estão uniformemente distribuídas em $\{0, 1\}$. Isto implica que as variáveis aleatórias $X_{q,n,1}, \dots, X_{q,n,n}$ são dependentes, pois o lado direito de (1.30) é diferente de $\binom{n}{k} 2^{-n}$. Além disso, tem-se que

$$\mathbf{E}S_{q,n} = \mathbf{E} \sum_{i=1}^n X_{q,n,i} = \sum_{i=1}^n \mathbf{E}X_{q,n,i} = \frac{n}{2}. \quad (1.37)$$

A função de probabilidade de $S_{q,n}$ definida em (1.30) é basicamente uma discretização da densidade q -gaussiana com parâmetros $q \leq 2$ e $\beta = 1$. Logo, podemos esperar que a função de probabilidade de $S_{q,n}$, após ser multiplicada por um fator apropriado, vai se aproximar de tal densidade q -gaussiana quando n assumir valores grandes. Mais precisamente, verifica-se numericamente que [37]

$$\sqrt{n}\mathbf{P}(S_{q,n} = k) \approx g_{q,1}(x_{q,n,k}), \quad 1 \leq q \leq 2, \quad k = 0, 1, \dots, n, \quad (1.38)$$

para valores grandes de n (ver figura 1.3). Se $q < 1$, de (1.31) e (1.32) temos que

$$\begin{aligned} Z_{q,n} &= \sum_{k=0}^n \left\{ 1 - \left[1 - 2 \left(\frac{k+1}{n+2} \right)^2 \right]^2 \right\}^{1/(1-q)} \\ &= \sum_{k=0}^{n+1} \left[1 - \left(1 - \frac{2k}{n+2} \right)^2 \right]^{1/(1-q)} \\ &= (n+2) \sum_{k=0}^{n+1} \frac{1}{n+2} \left[1 - \left(1 - \frac{2k}{n+2} \right)^2 \right]^{1/(1-q)}. \end{aligned} \quad (1.39)$$

A soma do lado direito converge a uma integral quando $n \rightarrow \infty$ [51]. Logo,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{Z_{q,n}}{n+2} = \int_0^1 [1 - (1-2x)^2]^{1/(1-q)} dx. \quad (1.40)$$

Fazendo a mudança de variáveis $y = (2x-1)/\sqrt{1-q}$, temos que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{Z_{q,n}}{n+2} = \frac{\sqrt{1-q}}{2} \int_{-\infty}^{\infty} g_{q,1}(y) dy. \quad (1.41)$$

Portanto,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{e_q^{-x_{q,n,k}^2}}{(n+2)\mathbf{P}(S_{q,n} = k)} = \frac{\sqrt{1-q}}{2} \int_{-\infty}^{\infty} g_{q,1}(y) dy. \quad (1.42)$$

Reordenando os termos, obtemos que¹³

$$\frac{n}{2} \sqrt{1-q} \mathbf{P}(S_{q,n} = k) \sim g_{q,1}(x_{q,n,k}), \quad n \rightarrow \infty. \quad (1.43)$$

O modelo probabilístico considerado neste capítulo dá origem, como um caso particular, a q -gaussianas com $q \in (1, 2]$ como distribuições limite. Logo, é natural nos perguntar se as variáveis aleatórias do nosso modelo são q' -independentes para algum q' . Para isto, é necessário verificarmos se uma versão generalizada de (1.26) para um número arbitrário de variáveis aleatórias se cumpre para cada linha de (1.29). A relação (1.26) é bastante limitante em relação a obtermos resultados analíticos, mesmo na análise de só duas variáveis. No entanto, é possível verificar numericamente que (1.29) não se cumpre para quaisquer duas variáveis da n -ésima linha de (1.29), nem se cumpre no caso limite $n \rightarrow \infty$. Curiosamente, este estudo numérico da q -independência nos revelou resultados um tanto inesperados, os quais são mencionados na subseção 1.4.2.

¹³Tem-se $a_n \sim b_n$ se $a_n/b_n \rightarrow 1$ quando $n \rightarrow \infty$.

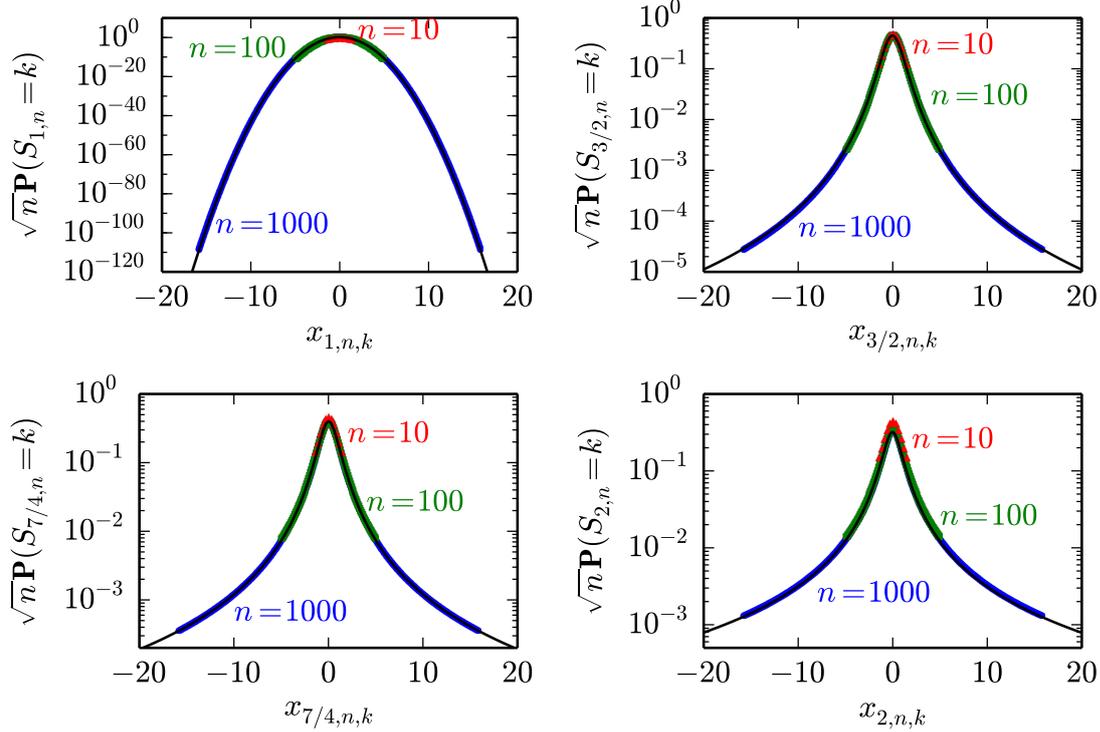


Figura 1.3: Representação de $\sqrt{n}\mathbf{P}(S_{q,n} = k)$ como função de $x_{q,n,k}$ para valores típicos de q e n ($k = 0, 1, \dots, n$). Vemos que os pontos se aproximam de uma densidade q -gaussiana (linha sólida) quando n cresce, o qual está de acordo com (1.38).

1.4 Comportamento limite de distribuições

Nesta seção estamos interessados no comportamento limite da distribuição conjunta de quaisquer m variáveis aleatórias da n -ésima linha de (1.29) quando $n \rightarrow \infty$. Primeiramente notamos que, devido à permutabilidade das variáveis aleatórias em cada linha de (1.29), é suficiente nos focar nas variáveis aleatórias $X_{q,n,1}, \dots, X_{q,n,m}$. Neste espírito, nosso primeiro passo vai ser encontrar a expressão da distribuição conjunta de $X_{q,n,1}, \dots, X_{q,n,m}$.

Sejam $x_1, \dots, x_m \in \{0, 1\}$ tais que $x_1 + \dots + x_m = l$. Logo, para todo $q \leq 2$,

$$\mathbf{P}(X_{q,n,1} = x_1, \dots, X_{q,n,m} = x_m) = \frac{1}{Z_{q,n}} \sum_{k=0}^{n-m} \binom{n-m}{k} \binom{n}{k+l}^{-1} e_q^{-x_{q,n,k+l}^2}. \quad (1.44)$$

Com efeito, primeiramente vemos que, se $n = m$, (1.44) é óbvia. No caso $n > m$,

temos que

$$\mathbf{P}(X_{q,n,1} = x_1, \dots, X_{q,n,m} = x_m) = \frac{1}{Z_{q,n}} \sum_{0 \leq x_{m+1}, \dots, x_n \leq 1} \left(l + \sum_{i=1}^{n-m} x_{m+i} \right)^{-1} e_q^{-x_{q,n,l+x_{m+1}+\dots+x_n}}. \quad (1.45)$$

Vemos que cada somando do lado direito de (1.45) depende do valor da soma $x_{m+1} + \dots + x_n$, mas não dos valores específicos de x_{m+1}, \dots, x_n . Logo, vemos facilmente que vão existir $\binom{n-m}{k}$ somandos associados à soma $x_{m+1} + \dots + x_n = k$. Portanto, (1.45) é equivalente a (1.44).

Para simplificar nosso estudo, vamos analisar especificamente as probabilidades

$$p_{q,n,m} = \mathbf{P}(X_{q,n,1} = 1, \dots, X_{q,n,m} = 1). \quad (1.46)$$

Segue imediatamente de (1.44) que:

$$p_{q,n,m} = \frac{1}{Z_{q,n}} \sum_{k=0}^{n-m} \left(\prod_{i=1}^m \frac{k+i}{n-i+1} \right) e_q^{-x_{q,n,k+m}}. \quad (1.47)$$

As seguintes seções dedicam-se ao estudo do comportamento limite de $p_{q,n,m}$ quando $n \rightarrow \infty$.

1.4.1 Caso $q < 1$

Diz-se que as variáveis aleatórias X_1, X_2, \dots são *descorrelacionadas* se $\mathbf{E}(X_i X_j) = \mathbf{E}X_i \mathbf{E}X_j$, $i \neq j$; caso contrário X_1, X_2, \dots são variáveis aleatórias *correlacionadas*. Vale ressaltarmos que variáveis aleatórias independentes são descorrelacionadas, mas a recíproca em geral é falsa [53].

Se $q < 1$, um estudo numérico nos mostra que a n -ésima linha de (1.29) está formada por n variáveis aleatórias correlacionadas, onde quaisquer duas variáveis são correlacionadas (ver figura 1.4). Mais ainda, tem-se que $p_{q,n,2} \not\rightarrow 1/2^2$ quando $n \rightarrow \infty$, ou seja, a correlação entre duas variáveis da n -ésima linha de (1.29) persiste mesmo após considerarmos o limite $n \rightarrow \infty$. Isto é algo que intuitivamente podemos esperar quando trabalhamos com variáveis aleatórias *fortemente correlacionadas*. Aqui usamos a expressão “fortes correlações” no sentido de que as variáveis aleatórias $X_{q,n,1}, \dots, X_{q,n,n}$ são correlacionadas e, além disso, a distribuição de $S_{q,n}$ não se aproxima de uma distribuição gaussiana conforme n cresce.

Neste ponto, cabe mencionarmos que um estudo sobre uma cadeia infinita de spins (ver [61]) revelou, entre outras coisas, que, ao se considerar uma parte de comprimento finito dela, as correlações quânticas permanecem no subsistema (analogamente ao nosso modelo probabilístico). As correlações, devidas principalmente ao emaranhamento quântico, são o suficientemente fortes como para fazer que a entropia S_q (ver capítulo 4) seja extensiva para um determinado valor de $q \neq 1$. Por exemplo, para um fenômeno crítico quântico de um modelo unidimensional de

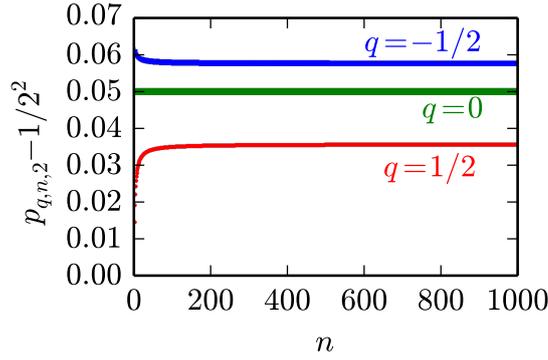


Figura 1.4: Representação de $p_{q,n,2} - 1/2^2$ como função de n para alguns valores de $q < 1$.

muitos corpos que pertence à classe de universalidade associada à carga central c , o valor do índice q está dado analiticamente por [61]

$$q = \frac{\sqrt{9 + c^2} - 3}{c}. \quad (1.48)$$

Em particular, para o regime crítico do modelo de Ising tem-se $c = 1/2$ (ver [62]) e, por conseguinte, $q = \sqrt{37} - 6 \approx 0.0828$.

1.4.2 Caso $q \geq 1$

Neste caso, um estudo numérico nos mostra que a n -ésima linha de (1.29) está formada por variáveis aleatórias fortemente correlacionadas; porém, paradoxalmente, quaisquer duas variáveis desta linha tornam-se assintoticamente independentes quando $n \rightarrow \infty$ (ver figura 1.5). Isto pode ser a razão pela qual (1.29) cumpre a lei dos grandes números quando $q \in [1, 2]$ (ver seção 2.3). De fato, independência por pares é suficiente para que um arranjo triangular como (1.29) cumpra a lei dos grandes números [52]. Nosso resultado numérico sugere que $p_{q,n,2} - 1/2^2$ se aproxima de zero como uma lei de potência da forma $1/n^\gamma$, onde γ depende ligeiramente de q .

Dado um inteiro positivo $m \leq n$, temos que

$$\text{Var} \sum_{i=1}^m X_{q,n,i} = \mathbf{E} \left(\sum_{i=1}^m X_{q,n,i} \right)^2 - \left(\mathbf{E} \sum_{i=1}^m X_{q,n,i} \right)^2. \quad (1.49)$$

Pela linearidade do valor esperado temos que

$$\mathbf{E} \sum_{i=1}^m X_{q,n,i}^2 = \mathbf{E} \sum_{i=1}^m X_{q,n,i} = \frac{m}{2}. \quad (1.50)$$

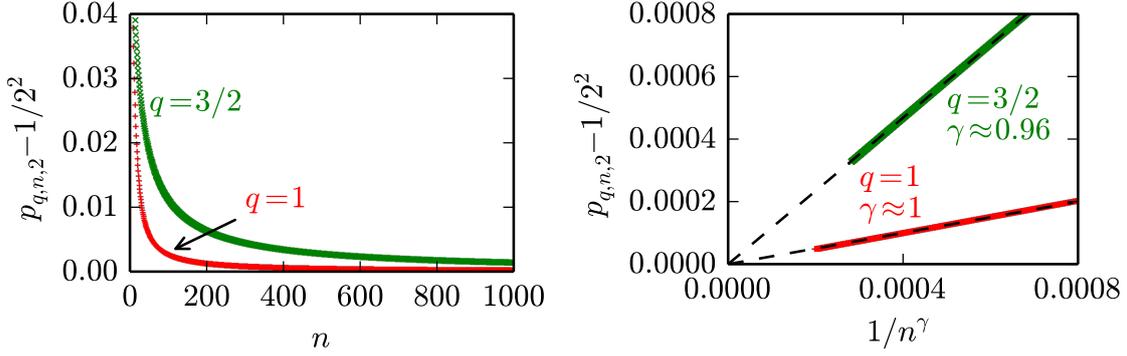


Figura 1.5: A figura da esquerda mostra a dependência em n de $p_{q,n,2} - 1/2^2$ para alguns valores de $q \geq 1$. A figura do lado direito sugere que $p_{q,n,2} - 1/2^2$ decai a zero como uma lei de potência da forma $1/n^\gamma$ quando $n \rightarrow \infty$, onde γ depende ligeiramente de q .

Logo,

$$\begin{aligned} \text{Var} \sum_{i=1}^m X_{q,n,i} &= \frac{m}{2} - \frac{m^2}{4} + 2 \sum_{1 \leq i < j \leq m} \mathbf{E}(X_{q,n,i} X_{q,n,j}) \\ &= \frac{m}{2} - \frac{m^2}{4} + 2 \sum_{1 \leq i < j \leq m} \mathbf{P}(X_{q,n,i} = 1, X_{q,n,j} = 1). \end{aligned} \quad (1.51)$$

Como $X_{q,n,1}, \dots, X_{q,n,n}$ são permutáveis, temos que $\mathbf{P}(X_{q,n,i} = 1, X_{q,n,j} = 1) = p_{q,n,2}$. Portanto,

$$\begin{aligned} \text{Var} \sum_{i=1}^m X_{q,n,i} &= \frac{m}{2} - \frac{m^2}{4} + m(m-1)p_{q,n,2}, \\ &= m \left(\frac{1}{2} - p_{q,n,2} \right) + m^2 \left(p_{q,n,2} - \frac{1}{4} \right). \end{aligned} \quad (1.52)$$

Segue daqui e do nosso resultado numérico para duas variáveis aleatórias que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \text{Var} \sum_{i=1}^m X_{q,n,i} = \frac{m}{4}, \quad (1.53)$$

onde $m/4$ seria a variância da soma das variáveis aleatórias $X_{q,n,1}, \dots, X_{q,n,m}$ se elas fossem independentes. Isto sugere que, assim como no caso $m = 2$, a correlação que existe entre m variáveis aleatórias da n -ésima linha de (1.29), com $m < n$ fixo, desaparece quando $n \rightarrow \infty$. De fato, a figura 1.6 sugere que, escolhendo um número fixo $m < n$ de variáveis aleatórias da n -ésima linha de (1.29), vamos obter que $p_{q,n,m} \rightarrow 1/2^m$ quando $n \rightarrow \infty$. Além disso, nosso resultado numérico sugere que $p_{3/2,n,m} - 1/2^m$ se aproxima de zero como uma lei de potência da forma $1/n^\gamma$, onde

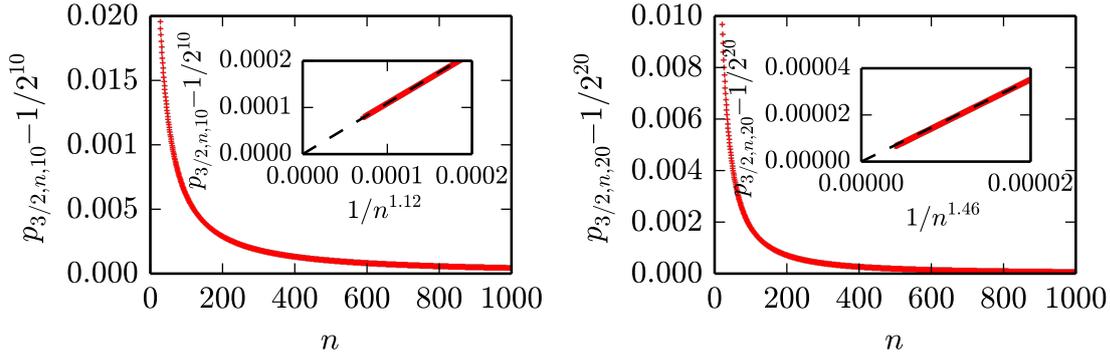


Figura 1.6: Representação de $p_{3/2,n,m} - 1/2^m$ como função de n para dois valores fixos de m . (Esquerda) $m = 10$. (Direita) $m = 20$. As figuras internas sugerem que $p_{3/2,n,10} - 1/2^{10}$ e $p_{3/2,n,20} - 1/2^{20}$ decaem a zero como leis de potência das formas $1/n^{1.12}$ e $1/n^{1.46}$ respectivamente.

γ depende de m . Portanto, juntando nossos resultados para duas e m variáveis, podemos concluir que $p_{q,n,m} - 1/2^m$ se aproxima de zero como uma lei de potência da forma $1/n^\gamma$, onde γ depende de q e m .

Como um possível exemplo físico do atual resultado paradoxal de independência assintótica, sugerimos o seguinte experimento: Consideremos uma amostra macroscópica de algum material que apresente uma transição de fase de segunda ordem. Vamos realizar medições (por exemplo, da susceptibilidade elétrica ou magnética) em uma parte de tamanho fixado da amostra. Esta parte pode ser macroscópica como a amostra toda; porém, seu tamanho deve ser muito menor do que da amostra toda. Conforme ajustamos a temperatura da amostra a valores próximos da temperatura crítica, o comprimento de correlação se incrementa e eventualmente ultrapassa o tamanho da parte da amostra na qual estamos focados. Nestas condições, os componentes microscópicos na amostra toda estão fortemente correlacionados; porém, é possível que, paradoxalmente, esta correlação não seja detectada no subsistema que estamos estudando.

Este cenário de independência assintótica muda completamente se, no lugar de escolher um número fixo $m < n$ de variáveis aleatórias da n -ésima linha de (1.29), escolhermos $m_n < n$ variáveis, onde $m_n \uparrow \infty$ (ou seja, $m_n \leq m_{n+1}$ e $m_n \rightarrow \infty$) (ver figura 1.7). Isto é algo que podemos esperar, pois as variáveis aleatórias da n -ésima linha de (1.29) não se tornam independentes quando $n \rightarrow \infty$; caso contrário, elas obedeceriam o teorema central do limite, contradizendo (1.38).

1.5 Conclusões

Estudamos o comportamento da distribuição conjunta de $m < n$ variáveis aleatórias da n -ésima linha do arranjo triangular (1.29). As variáveis aleatórias em (1.29) são fortemente correlacionadas e não obedecem o teorema central do limite. No entanto,

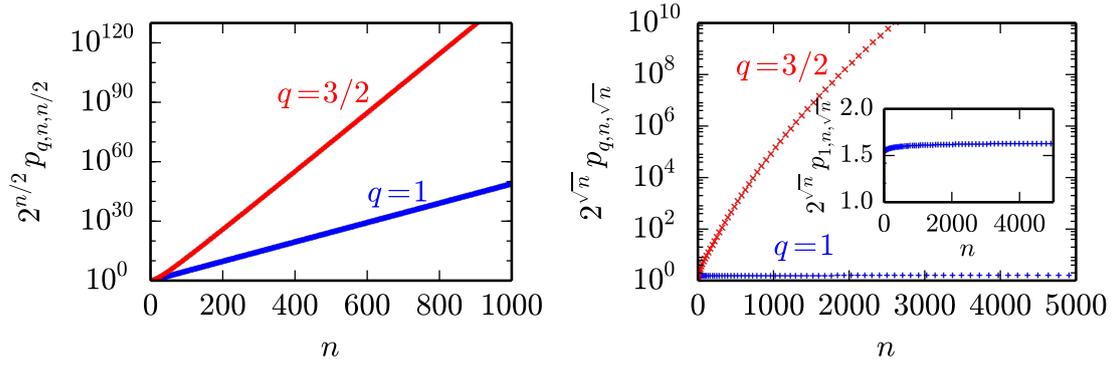


Figura 1.7: Representação de $2^{m_n} p_{q,n,m_n}$ como função de n para dois valores de q e duas escolhas de m_n . (Esquerda) $m_n = n/2$. (Direita) $m_n = \sqrt{n}$. Vemos que de maneira nenhuma se tem que $p_{q,n,m_n} \sim 1/2^{m_n}$ quando $n \rightarrow \infty$.

se $q \geq 1$, encontramos paradoxalmente que, quando m é um número fixo, as m variáveis aleatórias escolhidas tornam-se independentes quando $n \rightarrow \infty$. Isto implica que, se só nos restringimos a estudar um número finito de variáveis aleatórias, não seremos capazes de determinar se o conjunto de variáveis aleatórias está contido em um superconjunto de variáveis aleatórias independentes ou correlacionadas. Por outro lado, se analisamos um número de variáveis aleatórias da n -ésima linha de (1.29) que cresce com n , as correlações se mantêm na parte analisada mesmo após tomarmos o limite $n \rightarrow \infty$.

Em muitas ocasiões, na ciência, deseja-se estudar um sistema que cresce com o tempo (ou com algum outro parâmetro); por exemplo, a evolução de uma cultura microbiológica, a propagação de uma epidemia, entre outros. Porém, algumas vezes devido a dificuldades técnicas, somente é possível se realizar o estudo em uma parte do sistema de tamanho determinado, o qual é muito menor que o tamanho do sistema completo. Naturalmente, pode-se pensar que a análise de várias partes de tal tamanho é suficiente para se formular uma conclusão sobre o sistema completo. No entanto, como vimos na subseção 1.4.2, este procedimento pode dar origem a falsas afirmações sobre o sistema completo, especialmente se os componentes do sistema são fortemente correlacionados. Por outro lado, os resultados obtidos no estudo de partes que acompanham o crescimento do sistema podem ser generalizados ao sistema completo.

Capítulo 2

Breve introdução aos grandes desvios

Neste capítulo damos uma noção do que é um grande desvio usando um modelo probabilístico simples, que envolve variáveis aleatórias independentes com a mesma distribuição. Neste modelo encontramos analiticamente expressões assintóticas para a probabilidade de grandes desvios. Depois de isto, enunciamos alguns resultados gerais em teoria de grandes desvios e mostramos a definição abstrata do chamado princípio de grandes desvios. Finalmente apresentamos brevemente os resultados obtidos em um estudo do comportamento assintótico da probabilidade de grandes desvios em um caso de variáveis fortemente correlacionadas [41, 42].

2.1 Noção de grande desvio

O seguinte teorema é um resultado clássico de teoria de probabilidades [53]:

Lei dos grandes números. *Sejam Y_1, Y_2, \dots variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas e seja $Z_n = Y_1 + \dots + Y_n$. Se Y_1 tem valor esperado finito, então*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P \left(\left| \frac{Z_n}{n} - \mathbf{E}Y_1 \right| \geq \epsilon \right) = 0, \quad \epsilon > 0.$$

A lei dos grandes números nos diz que é improvável que a variável aleatória Z_n/n assumam valores que se encontram a distância positiva de $\mathbf{E}(Z_n/n)$ quando n é grande. Isto quer dizer que as probabilidades $\mathbf{P}(Z_n \leq nx)$ e $\mathbf{P}(Z_n \geq ny)$, com $x < \mathbf{E}(Z_n/n) < y$, tendem a zero quando $n \rightarrow \infty$. Nestas condições, os eventos $[Z_n \leq nx]$ e $[Z_n \geq ny]$ são chamados de *grandes desvios* e, pela lei dos grandes números, tornam-se eventos raros conforme n cresce.

Para darmos uma justificativa ao nome grande desvio, consideremos variáveis aleatórias discretas X_1, X_2, \dots independentes e uniformemente distribuídas em $\{0, 1\}$. As variáveis aleatórias X_1, X_2, \dots podem ser interpretadas como os resultados dos sucessivos lançamentos de uma moeda honesta, considerando $X_n = 1$ se a moeda cai cara no n -ésimo lançamento e $X_n = 0$ se cai coroa. Se definimos $S_n = X_1 + \dots + X_n$, nesta interpretação, S_n seria o número de caras obtidas até n lançamentos. Dado $x < 1/2$, o evento $[S_n \leq nx]$ é chamado de grande desvio porque considera desvios

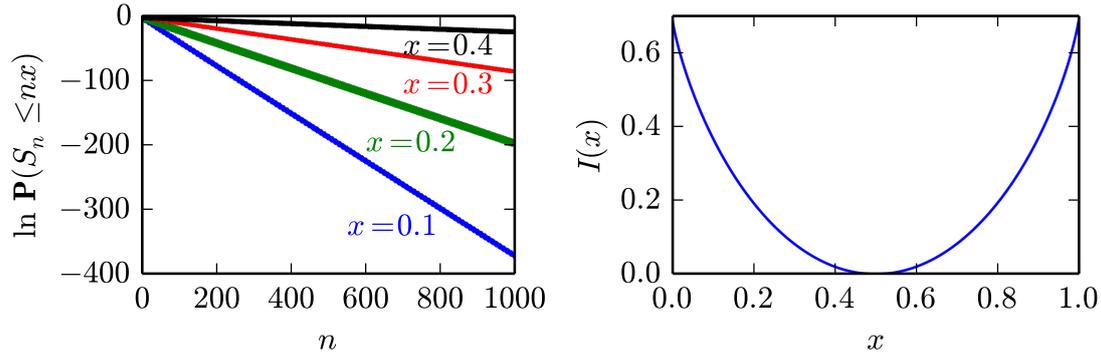


Figura 2.1: (Esquerda) Representação de $\ln \mathbf{P}(S_n \leq nx)$ como função de n para valores típicos de x . (Direita) Gráfico da “rate function” I . Vemos que I é uma função convexa que assume seu valor mínimo no ponto $1/2$.

da ordem de n de S_n a respeito de $\mathbf{E}S_n = n/2$; em comparação com o seu desvio padrão, que considera desvios da ordem de \sqrt{n} [2, 3].

De forma simplificada, uma *teoria de grandes desvios* é uma coleção de técnicas que refinam a lei dos grandes números, no sentido de que nos dão expressões assintóticas para a probabilidade de grandes desvios [2, 5]. Por exemplo, no caso da variável aleatória S_n definida acima, tem-se que (ver figura 2.1)¹

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \mathbf{P}(S_n \leq nx) = -I(x), \quad x \leq \frac{1}{2}, \quad (2.1)$$

onde²

$$I(x) = \begin{cases} \ln 2 + x \ln x + (1-x) \ln(1-x) & \text{se } x \in [0, 1] \\ \infty & \text{se } x \notin [0, 1]. \end{cases} \quad (2.2)$$

A relação (2.1) só dá informação sobre o termo dominante da probabilidade de grandes desvios. Mais ainda, ela diz que o termo dominante de $\mathbf{P}(S_n \leq nx)$ decai exponencialmente a zero quando $n \rightarrow \infty$. Com efeito, de (2.1), temos que

$$\mathbf{P}(S_n \leq nx) = e^{-n[I(x)+o(n)]}, \quad x \leq \frac{1}{2}. \quad (2.3)$$

Uma distribuição de probabilidade em um conjunto finito de n elementos está caracterizada por uma lista $p = (p_1, \dots, p_n)$ tal que $p_i \geq 0$ e $p_1 + \dots + p_n = 1$. Vamos chamar a lista p de uma *distribuição discreta*.

Sejam $p = (p_1, \dots, p_n)$ e $r = (r_1, \dots, r_n)$ duas distribuições discretas, onde $r_i > 0$. A *entropia relativa* (de Boltzmann-Gibbs) de p a respeito de r é definida por [4]

$$D(p|r) = \sum_{i=1}^n p_i \ln \frac{p_i}{r_i}. \quad (2.4)$$

¹A prova de (2.1) encontra-se no final da seção.

²Aqui adotamos a convenção $0 \ln 0 = 0$.

A função I definida em (2.2) é chamada de *rate function*. Tem-se que $I(x) = D(p|r)$, onde $p = (x, 1 - x)$ e $r = (1/2, 1/2)$.

Demonstração de (2.1). A prova de (2.1) está baseada na *fórmula de Stirling*, a qual estabelece que [63]

$$n! \sim \sqrt{2\pi n} n^{n+1/2} e^{-n}. \quad (2.5)$$

Vejam a prova. Se $0 \leq x \leq 1$, temos que $(S_n \leq nx) = [S_n \leq \lfloor nx \rfloor]$, onde $\lfloor y \rfloor$ denota o maior inteiro $\leq y$. Logo,

$$\mathbf{P}(S_n \leq nx) = \sum_{k=0}^{\lfloor nx \rfloor} \binom{n}{k} \frac{1}{2^n}. \quad (2.6)$$

Se $0 \leq k < (n+1)/2$, então $\binom{n}{k}$ é uma função monótona crescente de k . Com efeito,

$$\binom{n}{k} - \binom{n}{k-1} = \frac{n!}{k!(n-k+1)!} (n+1-2k) > 0. \quad (2.7)$$

Logo, segue de (2.6) que

$$\frac{1}{2^n} \binom{n}{\lfloor nx \rfloor} \leq \mathbf{P}(S_n \leq nx) \leq \frac{n+1}{2^n} \binom{n}{\lfloor nx \rfloor}, \quad (2.8)$$

o que implica que

$$\frac{1}{n} \ln \left(\frac{1}{2^n} \binom{n}{\lfloor nx \rfloor} \right) \leq \frac{1}{n} \ln \mathbf{P}(S_n \leq nx) \leq \frac{1}{n} \ln \left(\frac{n+1}{2^n} \binom{n}{\lfloor nx \rfloor} \right). \quad (2.9)$$

Se $0 \leq x \leq 1/2$, então, pela fórmula de Stirling, temos que³

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \binom{n}{\lfloor nx \rfloor} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} (\ln n! - \ln \lfloor nx \rfloor! - \ln(n - \lfloor nx \rfloor)!) \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} (n \ln n - \lfloor nx \rfloor \ln \lfloor nx \rfloor \\ &\quad - (n - \lfloor nx \rfloor) \ln(n - \lfloor nx \rfloor) + o(n)) \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{\lfloor nx \rfloor}{n} \ln \frac{n}{\lfloor nx \rfloor} + \frac{n - \lfloor nx \rfloor}{n} \ln \frac{n}{n - \lfloor nx \rfloor} \right) \\ &= -x \ln x - (1-x) \ln(1-x). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Usando isto em (2.9), obtemos (2.1).

³Dada uma função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, tem-se que $o(f(x))/f(x) \rightarrow 0$ quando $x \rightarrow \infty$.

2.2 Princípios de grandes desvios

Dado $\epsilon > 0$, segue de (2.1) que, para n suficientemente grande,⁴

$$e^{-n(I(x)-\epsilon)} \leq \mathbf{P}(S_n \leq nx) \leq e^{-n(I(x)+\epsilon)}, \quad 0 \leq x \leq 1/2. \quad (2.11)$$

Em geral, a determinação dos coeficientes de $-n$ em ambos os extremos desta desigualdade é o principal objetivo da teoria de grandes desvios, mesmo quando não se encontra uma expressão fechada para a “rate function” ou quando o limite em (2.1) não exista.

Nós obtivemos (2.1) partindo diretamente da expressão de $\mathbf{P}(S_n \leq nx)$. Em geral, isto não sempre é viável e é aqui onde as técnicas de grandes desvios entram em jogo. Por exemplo, um resultado da teoria de grandes desvios é o seguinte [4]:

Teorema de Cramér-Chernoff. *Sejam Y_1, Y_2, \dots variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas e seja $Z_n = Y_1 + \dots + Y_n$. Definamos⁵*

$$I(y) = \sup_{t \in \mathbb{R}} (ty - \ln \mathbf{E}e^{tY_1}), \quad y \in \mathbb{R}. \quad (2.12)$$

Logo,

a) *Se Y_1 tem valor esperado finito, então*

$$\mathbf{P}(Z_n \leq ny) \leq e^{-nI(y)}, \quad y \leq \mathbf{E}Y_1. \quad (2.13)$$

b) *Para todo y real, tem-se que⁶*

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \mathbf{P}(Z_n \leq ny) \geq -I(y). \quad (2.14)$$

O teorema de Cramér-Chernoff fornece uma maneira de calcular a “rate function” $I(y)$ sem a necessidade de se conhecer a expressão de $\mathbf{P}(Z_n \leq ny)$. Além disso, notamos que a “rate function” é a *transformada de Fenchel-Legendre* [64] do logaritmo da *função geradora de momentos* de Y_1 , $\phi(t) = \mathbf{E}e^{tY_1}$.

Como vimos até agora, a entropia de Boltzmann-Gibbs e a transformada de Fenchel-Legendre aparecem naturalmente no contexto da teoria de grandes desvios. Por outro lado, sabemos que estes conceitos aparecem também na mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs e na termodinâmica. Desta maneira, identificando grandezas termodinâmicas (por exemplo, entropia, energia livre) com funções que

⁴A expressão “para n suficientemente grande” significa para qualquer valor de n acima de um determinado valor.

⁵Dado um conjunto de números reais A , $\sup A$ e $\inf A$ denotam, respectivamente, o supremo (menor cota superior) e o ínfimo (maior cota inferior) de A . Dada uma função real f , $\sup f$ e $\inf f$ denotam respectivamente o supremo e o ínfimo do conjunto dos valores da função f [51].

⁶Dada uma sequência de números reais $(x_n)_{n \geq 1}$, $\limsup_{n \rightarrow \infty} x_n$ e $\liminf_{n \rightarrow \infty} x_n$ denotam, respectivamente, o maior e o menor dos limites das subsequências de $(x_n)_{n \geq 1}$ [51].

aparecem na teoria de grandes desvios (por exemplo, “rate function”, função geradora de momentos), podemos concluir que a linguagem matemática da mecânica estatística é a teoria de grandes desvios [2, 5, 6].

Vejamus uma aplicação do teorema de Cramér-Chernoff. A sequência de variáveis aleatórias $(X_n)_{n \geq 1}$ definida na seção 2.1 cumpre as condições do teorema de Cramér-Chernoff. Vamos ver agora que (2.1) segue facilmente deste teorema. Notamos primeiro que $\mathbf{E}e^{tX_1} = (1 + e^t)/2$. Logo, se $f(t) = tx - \ln \mathbf{E}e^{tX_1}$, então

$$f'(t) = x - \frac{e^t}{1 + e^t} \quad \text{e} \quad f''(t) = -\frac{e^t}{(1 + e^t)^2} < 0. \quad (2.15)$$

Por conseguinte, a função f possui um único máximo no ponto $t_0 := \ln x - \ln(1 - x)$. De (2.12) temos que $I(x) = \sup f = f(t_0)$, logo

$$\begin{aligned} I(x) &= x \ln x - x \ln(1 - x) - \ln \left(\frac{1}{2} \left(1 + \frac{x}{1 - x} \right) \right) \\ &= \ln 2 + x \ln x + (1 - x) \ln(1 - x). \end{aligned} \quad (2.16)$$

Além disso, (2.1) segue diretamente de (2.13) e (2.14).

Pode-se provar como corolário do teorema de Cramér-Chernoff que [4], se Y_1, Y_2, \dots são variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas e se $Z_n = Y_1 + \dots + Y_n$,⁷

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \mathbf{P}(Z_n \in F) \leq - \inf_{y \in F} I(y), \quad F \subset \mathbb{R} \text{ fechado} \quad (2.17)$$

e

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \mathbf{P}(Z_n \in G) \geq - \inf_{y \in G} I(y), \quad G \subset \mathbb{R} \text{ aberto}, \quad (2.18)$$

onde a função I foi definida em (2.12). Este corolário contém a base da seguinte definição introduzida por Varadhan.⁸ Diz-se que uma sequência $(\mu_n)_{n \geq 1}$ de distribuições em \mathbb{R}^d satisfaz um *princípio de grandes desvios* com escala $a_n \uparrow \infty$ e “rate function” $I : \mathbb{R}^d \rightarrow [0, \infty]$ se se satisfazem as seguintes condições:

- a) A função I é *semicontínua inferior*, ou seja, se $x_n \rightarrow x$, $\liminf_{n \rightarrow \infty} I(x_n) \geq I(x)$;
- b) para todo conjunto aberto $G \subset \mathbb{R}^d$, tem-se que

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{a_n} \ln \mu_n(G) \geq - \inf_{x \in G} I(x); \quad (2.19)$$

⁷Diz-se que um conjunto $G \subset \mathbb{R}^d$ é *aberto* se para cada $p \in G$ existe $r > 0$ tal que o conjunto $\{x \in \mathbb{R}^d : |x - p| < r\}$ é um subconjunto de G . Diz-se que um conjunto $F \subset \mathbb{R}^d$ é *fechado* se seu complementar é aberto [65].

⁸Aqui apresentamos uma versão bastante simplificada.

c) para todo conjunto fechado $F \subset \mathbb{R}^d$, tem-se que

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{a_n} \ln \mu_n(F) \leq - \inf_{x \in F} I(x). \quad (2.20)$$

Resultados de grandes desvios para variáveis aleatórias moderadamente dependentes podem ser de utilidade no estudo de cadeias de Markov ou nos sistemas descritos pela mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs. O seguinte resultado, na sua forma mais simplificada, é um análogo ao teorema de Cramér-Chernoff para variáveis moderadamente dependentes [4]:

Teorema de Gärtner-Ellis. *Sejam W_1, W_2, \dots variáveis aleatórias. Se as seguintes condições são satisfeitas:*

- a) $\phi_n(t) := \mathbf{E}e^{tW_n} < \infty$ para todo $t \in \mathbb{R}$;
- b) existe $a_n \uparrow \infty$ tal que $f(t) := \lim_{n \rightarrow \infty} a_n^{-1} \ln \phi_n(a_n t) \in (-\infty, \infty]$ para todo $t \in \mathbb{R}$;
- c) a função f é diferenciável,

então a sequência formada pelas distribuições de W_1, W_2, \dots satisfaz um princípio de grandes desvios com escala a_n e “rate function” f^* , onde f^* é a transformada de Fenchel-Legendre de f .

Vejamos um par de exemplos simples:

- a) Consideremos as variáveis aleatórias S_n, X_1, X_2, \dots definidas na seção 2.1. Vamos utilizar o teorema de Gärtner-Ellis para encontrar o comportamento assintótico da distribuição de $Z_n/n = (S_1 + \dots + S_n)/n^2$. Para isto vemos que

$$\phi_n(t) := \mathbf{E}e^{tZ_n/n} = \mathbf{E}e^{t(S_1 + \dots + S_n)/n^2} = \mathbf{E} \exp \left(\frac{t}{n^2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^i X_j \right). \quad (2.21)$$

Como as variáveis aleatórias X_1, X_2, \dots são independentes e estão uniformemente distribuídas no conjunto $\{0, 1\}$, então

$$\phi_n(t) = \prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^i \left(\frac{e^{t/n^2}}{2} + \frac{1}{2} \right) = \left(\frac{e^{t/n^2} + 1}{2} \right)^{n(n+1)/2}. \quad (2.22)$$

Notamos que

$$\frac{1}{n^2} \ln \phi_n(n^2 t) = \frac{n(n+1)}{2n^2} [\ln(e^t + 1) - \ln 2]. \quad (2.23)$$

Logo, temos que

$$f(t) := \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n^2} \ln \phi_n(n^2 t) = \frac{1}{2} [\ln(e^t + 1) - \ln 2], \quad (2.24)$$

de onde percebemos mediatamente que a função f é diferenciável. Por conseguinte, a sequência Z_n/n satisfaz as condições do teorema de Gärtner-Ellis. Logo, a sequência formada pelas distribuições de $Z_1/1, Z_2/2, \dots$ satisfaz um princípio de grandes desvios com escala n^2 e rate function $f^*(x) = \sup_{t \in \mathbb{R}} [tx - f(t)]$. A função $g(t) = tx - f(t)$ assume seu valor máximo no ponto $t = \ln(2x) - \ln(1 - 2x)$ se $0 < x < 1/2$. Logo, obtemos que

$$f^*(x) = \begin{cases} \frac{\ln 2}{2} + x \ln(2x) + \left(\frac{1}{2} - x\right) \ln(1 - 2x) & \text{se } x \in [0, 1/2] \\ \infty & \text{se } x \notin [0, 1/2]. \end{cases} \quad (2.25)$$

b) No contexto do exemplo anterior, seja $W_n = S_1/1 + \dots + S_n/n$. Vamos provar que a sequência formada pelas distribuições de $W_1/1, W_2/2, \dots$ satisfaz um princípio de grandes desvios. Para isto vemos que

$$\begin{aligned} \phi_n(t) &:= \mathbf{E} e^{tW_n/n} = \mathbf{E} \exp \left[\frac{t}{n} \left(\frac{S_1}{1} + \dots + \frac{S_n}{n} \right) \right] \\ &= \mathbf{E} \exp \left(\frac{t}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^i \frac{1}{i} X_j \right) \\ &= \prod_{i=1}^n \left(\frac{e^{t/(ni)} + 1}{2} \right)^i. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Notamos que

$$\begin{aligned} \frac{1}{n^2} \ln \phi_n(n^2 t) &= \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n i [\ln(e^{nt/i} + 1) - \ln 2] \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{i}{n} \ln(e^{nt/i} + 1) - \frac{n(n+1)}{n^2} \ln 2. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Logo, temos que

$$f(t) := \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n^2} \ln \phi_n(n^2 t) = \int_0^1 x \ln(e^{t/x} + 1) dx - \frac{\ln 2}{2}, \quad (2.28)$$

que existe para todo $t \in \mathbb{R}$, pois a função $g(x) = x \ln(e^{t/x} + 1)$ é contínua no intervalo $[0, 1]$ (pondo $g(0) = t$). Além disso, dg/dt , como função de x , é contínua no intervalo $[0, 1]$. Logo, a função f é diferenciável em toda a reta real. Portanto, pelo teorema de Gärtner-Ellis, a sequência formada pelas distribuições de $W_1/1, W_2/2, \dots$ satisfaz um princípio de grandes desvios com escala n^2 e rate function $f^*(x) = \sup_{t \in \mathbb{R}} [tx - f(t)]$. Neste caso a expressão da rate function não pode ser encontrada analiticamente.

2.3 Grandes desvios em sistemas fortemente correlacionados

Recentemente fizeram-se alguns esforços para se tentar generalizar a definição de princípio de grandes desvios com o intuito de admitir decaimento do tipo q -exponencial para a probabilidade de grandes desvios [41, 42] (ver também [43]). A motivação destes estudos envolve principalmente a fundamentação matemática da mecânica estatística não extensiva, a qual lida com sistemas fortemente correlacionados, onde distribuições q -exponenciais e q -gaussianas aparecem naturalmente [8].

Na referência [41] estuda-se o comportamento assintótico da probabilidade de grandes desvios no modelo probabilístico que definimos na seção 1.3 quando $q \in [1, 2]$. Lembrando que neste modelo a distribuição de $S_{q,n}$ está dada por (1.30), temos que, para $x \in [0, 1/2)$, a probabilidade de grandes desvios está dada por

$$\mathbf{P}(S_{q,n} \leq nx) = \frac{1}{Z_{q,n}} \sum_{k=0}^{\lfloor nx \rfloor} e_q^{-x^2_{q,n,k}}. \quad (2.29)$$

Para valores arbitrários de q , tanto a série em (2.29) como $Z_{q,n}$ não possuem expressões fechadas; por conseguinte, o tratamento analítico direto é impossível. No entanto, um estudo numérico revela que, conforme n cresce, a probabilidade de grandes desvios decai a zero como uma q' -exponencial (ver figura 2.2) com [41]

$$q' = \frac{2(q-1)}{3-q} + 1. \quad (2.30)$$

Mais precisamente, a figura 2.2 sugere que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln_{q'} \mathbf{P}(S_{q,n} \leq nx) = -I_q(x), \quad 0 \leq x < \frac{1}{2}, \quad (2.31)$$

onde a expressão analítica de $I_q(x)$, que cumpriria o papel da “rate function”, ainda é desconhecida.

Cabe mencionarmos que a relação (2.30) foi encontrada de forma heurística [41]. Ela pode ser rescrita de maneira mais elegante como

$$\frac{2}{q'-1} = \frac{2}{q-1} - 1 \quad \text{ou} \quad \frac{1}{q'-1} = \frac{1}{1-q} + \frac{1}{2}. \quad (2.32)$$

Analogamente a (2.1), (2.31) nos diz que

$$\mathbf{P}(S_{q,n} \leq nx) = e_q^{-n[I_q(x)+o(n)]}, \quad x \leq \frac{1}{2}, \quad (2.33)$$

ou seja, o termo dominante de $\mathbf{P}(S_{q,n} \leq nx)$ decai a zero com n como uma q' -exponencial. O fato de aparecer a função q -exponencial em (2.33) pode parecer um pouco artificial, pois, por exemplo, a relação

$$\mathbf{P}(S_{q,n} \leq nx) = \frac{1}{\{n(q'-1)[I_q(x) + o(n)]\}^{1/(q'-1)}}, \quad x \leq \frac{1}{2}, \quad (2.34)$$

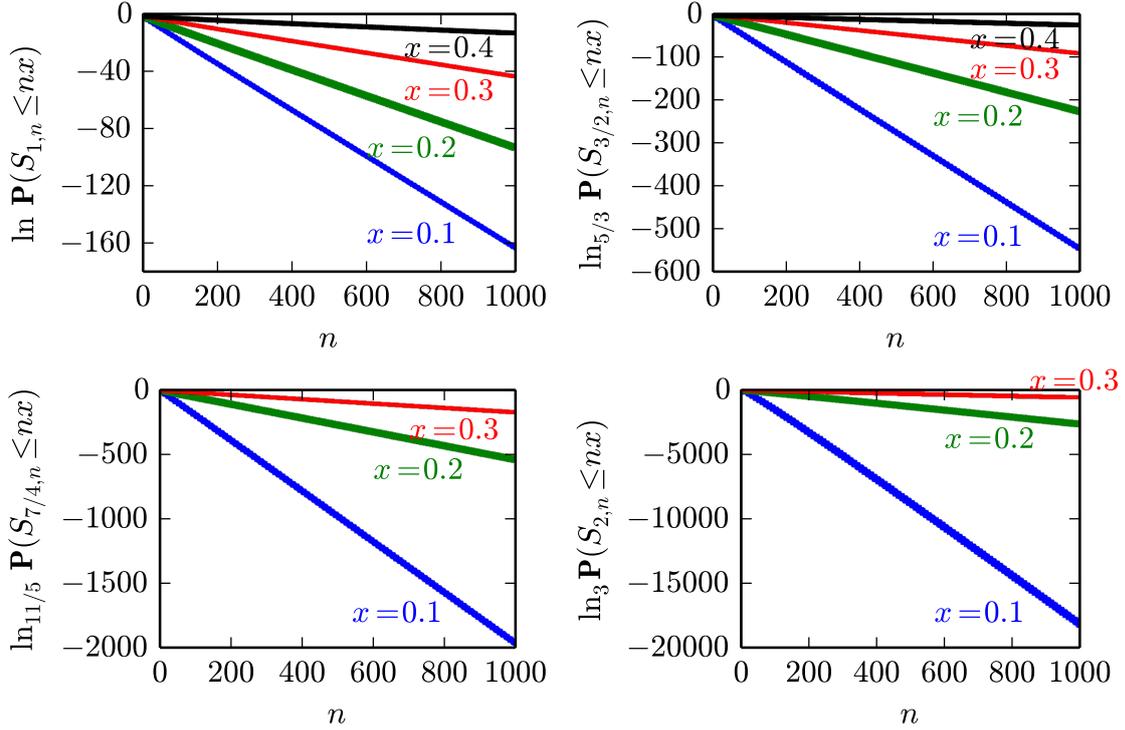


Figura 2.2: Representação de $\ln_q \mathbf{P}(S_{q,n} \leq nx)$ como função de n para valores típicos de q e x . As figuras ilustram que, conforme n cresce, a probabilidade de grandes desvios decai a zero como uma q' -exponencial com q' dado por (2.30).

também é correta [66]. No entanto, um estudo numérico mais refinado mostrou que o termo subdominante em (2.33) é compatível com o de uma q -exponencial [42]. Isto descarta a possibilidade de que, no modelo atual, a probabilidade de grandes desvios, por exemplo, decaia como uma exponencial de Kaniadakis, a qual está definida por [67]

$$E_\kappa(y) = (\kappa y + \sqrt{1 + \kappa^2 y^2})^{1/\kappa}, \quad \kappa > 0, \quad y \in \mathbb{R}. \quad (2.35)$$

A relação (2.33) implica que o arranjo triangular (1.29) cumpre a lei dos grandes números quando $q \in [1, 2]$. Com efeito, podemos intuir da simetria da distribuição de S_n , definida em (1.30), que

$$\mathbf{P}(S_{q,n} \geq n - nx) = \mathbf{P}(S_{q,n} \leq nx), \quad 0 \leq x \leq 1. \quad (2.36)$$

Logo, dado $\epsilon > 0$, temos que

$$\begin{aligned} \mathbf{P}\left(\frac{S_{q,n}}{n} - \frac{1}{2} \geq \epsilon\right) &= \mathbf{P}\left(S_{q,n} > n\epsilon + \frac{n}{2}\right) \\ &= \mathbf{P}\left(S_{q,n} \leq \frac{n}{2} - n\epsilon\right) \\ &= \mathbf{P}\left(\frac{S_{q,n}}{n} - \frac{1}{2} \leq -\epsilon\right). \end{aligned} \quad (2.37)$$

Utilizando (2.33), temos que

$$\mathbf{P}\left(\frac{S_{q,n}}{n} - \frac{1}{2} \geq \epsilon\right) = \mathbf{P}\left(\frac{S_{q,n}}{n} - \frac{1}{2} \leq -\epsilon\right) = e_{q'}^{-n[I_q(\epsilon+1/2)+o(n)]}. \quad (2.38)$$

Portanto,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}\left(\left|\frac{S_{q,n}}{n} - \frac{1}{2}\right| \geq \epsilon\right) = 0. \quad (2.39)$$

Demonstração de (2.36). Por completeza vamos provar (2.36). Temos que

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(S_{q,n} \geq n - nx) &= \mathbf{P}(S_{q,n} \geq \lceil n - nx \rceil) \\ &= \sum_{k=\lceil n - nx \rceil}^n \mathbf{P}(S_{q,n} = k) \\ &= \sum_{k=0}^{n - \lceil n - nx \rceil} \mathbf{P}(S_{q,n} = n - k), \end{aligned} \quad (2.40)$$

onde $\lceil y \rceil$ é o menor inteiro $\geq y$. Ora, segue de (1.30) que

$$\mathbf{P}(S_{q,n} = n - k) = \mathbf{P}(S_{q,n} = k), \quad k = 0, 1, \dots, n, \quad (2.41)$$

pois $x_{q,n,n-k} = -x_{q,n,k}$. Logo,

$$\mathbf{P}(S_{q,n} \geq n - nx) = \sum_{k=0}^{n - \lceil n - nx \rceil} \mathbf{P}(S_{q,n} = k). \quad (2.42)$$

Se provamos que $n - \lceil n - nx \rceil = \lfloor nx \rfloor$, então (2.36) ficará provado. Porém, isto segue diretamente do seguinte lema: *Dado um número real y , tem-se que $-\lceil y \rceil = \lfloor -y \rfloor$ e $\lfloor y + l \rfloor = \lfloor y \rfloor + l$ para todo inteiro l .* Com efeito, para provar que $-\lceil y \rceil = \lfloor -y \rfloor$, observamos que, por um lado $y \leq \lceil y \rceil \Rightarrow -\lceil y \rceil \leq -y \Rightarrow -\lceil y \rceil \leq \lfloor -y \rfloor$ (leia-se ‘ \Rightarrow ’ como ‘implica’). Por outro lado, $\lfloor -y \rfloor \leq -y \Rightarrow y \leq -\lfloor -y \rfloor \Rightarrow \lceil y \rceil \leq -\lfloor -y \rfloor \Rightarrow \lfloor -y \rfloor \leq -\lceil y \rceil$. Analogamente, para provar que $\lfloor y + l \rfloor = \lfloor y \rfloor + l$, notamos que, por um lado, $\lfloor y \rfloor + l \leq y + l \Rightarrow \lfloor y \rfloor + l \leq \lfloor y + l \rfloor$. Por outro lado, $\lfloor y + l \rfloor \leq y + l \Rightarrow \lfloor y + l \rfloor - l \leq y \Rightarrow \lfloor y + l \rfloor - l \leq \lfloor y \rfloor \Rightarrow \lfloor y + l \rfloor \leq \lfloor y \rfloor + l$.

Capítulo 3

Convergência da probabilidade de grandes desvios em sistemas fortemente correlacionados

Neste capítulo apresentamos nossa contribuição ao estudo do comportamento assintótico da probabilidade de grandes desvios em um sistema que apresenta correlações fortes [45]. Especificamente, consideramos um modelo probabilístico que apresenta q -gaussianas com $q < 1$ como distribuições limite [38] (ver também [37, 68]). Vamos ver que, neste modelo, a lei dos grandes números não se cumpre. Mesmo assim, vamos mostrar resultados sobre a rapidez de convergência da probabilidade de grandes desvios ao seu limite, em geral, não nulo.

3.1 Modelo probabilístico

Consideremos variáveis aleatórias permutáveis $X_{\alpha,1}, X_{\alpha,2}, \dots$ que tomam valores no conjunto $\{0, 1\}$ tais que a função de probabilidade de $T_{\alpha,n} := X_{\alpha,1} + \dots + X_{\alpha,n}$ esteja dada por

$$\mathbf{P}(T_{\alpha,n} = k) = \binom{n}{k} \frac{B(\alpha + k, \alpha + n - k)}{B(\alpha, \alpha)}, \quad \alpha > 0, k = 0, 1, \dots, n, \quad (3.1)$$

onde $B(x, y)$ é a função beta, definida em (1.6). A relação (3.1) define de fato a distribuição de $T_{\alpha,n}$, pois, utilizando (1.6) e o teorema binomial, temos que

$$\mathbf{P}(T_{\alpha,n} \in \mathbb{R}) = \frac{1}{B(\alpha, \alpha)} \int_0^1 \left[\sum_{k=0}^n \binom{n}{k} t^k (1-t)^{n-k} \right] t^{\alpha-1} (1-t)^{\alpha-1} dt = 1. \quad (3.2)$$

A função de probabilidade de $T_{\alpha,n}$ definida em (3.1) foi escrita originalmente para α inteiro [37], mas depois foi generalizada para qualquer $\alpha > 0$ [38], que é a versão que estamos utilizando. Por sua vez, esta versão também foi obtida como um caso particular de uma distribuição binomial deformada [68].

Segue imediatamente de (3.1) que as variáveis aleatórias $X_{\alpha,1}, X_{\alpha,2}, \dots$ estão uniformemente distribuídas em $\{0, 1\}$. Isto implica que $\mathbf{E}T_{\alpha,n} = n/2$ e que as variáveis

aleatórias $X_{\alpha,1}, X_{\alpha,2}, \dots$ são dependentes, pois o lado direito de (3.1) é diferente de $\binom{n}{k}2^{-n}$. Mais ainda, as variáveis aleatórias $X_{\alpha,1}, X_{\alpha,2}, \dots$ são correlacionadas, pois

$$\mathbf{E}(X_{\alpha,i}X_{\alpha,j}) = \mathbf{P}(X_{\alpha,i} = 1, X_{\alpha,j} = 1) = \mathbf{P}(T_{\alpha,2} = 2) = \frac{\alpha + 1}{4\alpha + 2} \neq \frac{1}{4}. \quad (3.3)$$

Na seção 3.2, vamos ver que, de fato, as variáveis aleatórias $X_{\alpha,1}, X_{\alpha,2}, \dots$ são fortemente correlacionadas (no sentido do que foi dito na subseção 1.4.1).

Sejam $x_1, \dots, x_n \in \{0, 1\}$ tais que $x_1 + \dots + x_n = k$. Utilizando as identidades [54]

$$B(x, y) = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)} \quad \text{e} \quad \Gamma(x+1) = x\Gamma(x), \quad x, y > 0, \quad (3.4)$$

temos que,¹

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(X_{\alpha,1} = x_1, \dots, X_{\alpha,n} = x_n) &= \frac{\Gamma(2\alpha) \Gamma(\alpha + k) \Gamma(\alpha + n - k)}{\Gamma(\alpha)^2 \Gamma(2\alpha + n)} \\ &= \frac{[\prod_{i=0}^{k-1} (\alpha + i)] [\prod_{i=0}^{n-1-k} (\alpha + i)]}{\prod_{i=0}^{n-1} (2\alpha + i)}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Logo, $\mathbf{P}(X_{\alpha,1} = x_1, \dots, X_{\alpha,n} = x_n) \rightarrow 1/2^n$ quando $\alpha \rightarrow \infty$, de onde segue que $X_{\alpha,1}, X_{\alpha,2}, \dots$ tornam-se independentes quando $\alpha \rightarrow \infty$.

3.2 Interpretação das variáveis aleatórias

Obviamente, as variáveis aleatórias $X_{\alpha,1}, X_{\alpha,2}, \dots$ podem ser interpretadas como os resultados dos sucessivos lançamentos de uma moeda (com certo tipo de memória temporal), considerando $X_{\alpha,n} = 1$ se a moeda cai cara no n -ésimo lançamento e $X_{\alpha,n} = 0$ se cai coroa. Nesta interpretação, $T_{\alpha,n}$ seria o número de caras obtidas até n lançamentos.

Mesmo considerando lançamento de moedas, o que também foi feito na seção 1.3, vemos que o modelo atual possui uma interpretação que o modelo considerado na seção 1.3 não admite. Especificamente, o modelo da seção 1.3 não pode ser associado à repetição de um experimento no tempo. Isto se deve a que, se $q \neq 0$,² a distribuição definida em (1.30) não satisfaz uma condição de consistência como a distribuição definida em (3.1), para a qual temos que

$$\binom{n}{k}^{-1} \mathbf{P}(T_{\alpha,n} = k) = \binom{n+1}{k+1}^{-1} \mathbf{P}(T_{\alpha,n+1} = k+1) + \binom{n+1}{k}^{-1} \mathbf{P}(T_{\alpha,n+1} = k) \quad (3.6)$$

¹Adotamos aqui a convenção $\prod_{i=a}^b x_i = 1$ se $b < a$.

²Segundo (1.30), a função de probabilidade da variável aleatória $S_{0,n}$ está dada por

$$\mathbf{P}(S_{0,n} = k) = \frac{(k+1)(n-k+1)}{\sum_{k=0}^n (k+1)(n-k+1)} = \binom{n}{k} \frac{B(2+k, 2+n-k)}{B(2, 2)} = \mathbf{P}(T_{2,n} = k).$$

Portanto, o arranjo triangular (1.29) com $q = 0$ satisfaz uma condição análoga a (3.6). Segue também daqui que $p_{0,n,2} = \mathbf{P}(T_{2,n} = 2) = 1/20$ (ver figura 1.4).

para cada $k = 0, 1, \dots, n$. Com efeito, utilizando as identidades (3.4), temos que o lado direito de (3.6) é igual a

$$\begin{aligned}
 & \frac{B(\alpha + k + 1, \alpha + n - k)}{B(\alpha, \alpha)} + \frac{B(\alpha + k, \alpha + n - k + 1)}{B(\alpha, \alpha)} \\
 &= \frac{1}{B(\alpha, \alpha)} \left(\frac{\Gamma(\alpha + k + 1)\Gamma(\alpha + n - k)}{\Gamma(2\alpha + n + 1)} + \frac{\Gamma(\alpha + k)\Gamma(\alpha + n - k + 1)}{\Gamma(2\alpha + n + 1)} \right) \\
 &= \frac{\Gamma(\alpha + k)\Gamma(\alpha + n - k)}{B(\alpha, \alpha)\Gamma(2\alpha + n + 1)} (\alpha + k + \alpha + n - k) \\
 &= \frac{B(\alpha + k, \alpha + n - k)}{B(\alpha, \alpha)}.
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

Além da interpretação dada acima, podemos dar uma interpretação física às variáveis aleatórias $X_{\alpha,1}, X_{\alpha,2}, \dots$. Consideremos um conjunto de n spins $1/2$ tais que o valor da projeção do i -ésimo spin no eixo α seja $X_i - 1/2$. Desta maneira,

$$M_{\alpha,n} := T_{\alpha,n} - \frac{n}{2} \tag{3.8}$$

vai ser o momento magnético total do sistema. O limite termodinâmico corresponde ao limite $n \rightarrow \infty$. Portanto, a magnetização por partícula do sistema está dada por $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{E}(M_{\alpha,n}/n)$. Os spins estão fortemente correlacionados e, além disso, todas as configurações microscópicas que produzem um valor pre-fixado do momento magnético total do sistema têm a mesma probabilidade. Isto é consequência de as variáveis aleatórias $X_{\alpha,1}, X_{\alpha,2}, \dots$ serem permutáveis.

Hanel *et al* [38] mostraram que

$$n\mathbf{P}(T_{\alpha,n} = k) \approx \frac{1}{B(\alpha, \alpha)} \left(\frac{k}{n}\right)^{\alpha-1} \left(1 - \frac{k}{n}\right)^{\alpha-1}, \quad \alpha > 0, k = 0, 1, \dots, n, \tag{3.9}$$

para valores grandes de n . Esta relação pode ser convenientemente escrita em termos da variável aleatória $M_{\alpha,n}$. Para isto, vemos que $[M_{\alpha,n} = m] = [T_{\alpha,n} = m + n/2]$, onde m assume valores inteiros entre $-n/2$ e $n/2$ se n é par; caso contrário, m assume valores semi-inteiros entre $-n/2$ e $n/2$. Logo, utilizando (3.9), temos que

$$\begin{aligned}
 \mathbf{P}(M_{\alpha,n} = m) &\approx \frac{1}{nB(\alpha, \alpha)} \left(\frac{m}{n} + \frac{1}{2}\right)^{\alpha-1} \left(\frac{1}{2} - \frac{m}{n}\right)^{\alpha-1} \\
 &= \frac{1}{nB(\alpha, \alpha)} \left[\frac{1}{4} - \left(\frac{m}{n}\right)^2\right]^{\alpha-1} \\
 &= \frac{1}{n2^{2\alpha-2}B(\alpha, \alpha)} \left\{1 - \frac{1}{\alpha-1} \left[4(\alpha-1) \left(\frac{m}{n}\right)^2\right]\right\}^{\alpha-1}.
 \end{aligned} \tag{3.10}$$

Comparando esta expressão com a definição da densidade q -gaussiana com parâmetros

$$q = 1 - \frac{1}{\alpha-1} < 1 \quad \text{e} \quad \beta = 4(\alpha-1), \tag{3.11}$$

obtemos que

$$\mathbf{P}(M_{\alpha,n} = m) \approx \frac{1}{n} g_{q,\beta}(m/n), \quad \alpha > 1, \quad (3.12)$$

para valores grandes de n .

3.3 A lei dos grandes números não se cumpre

Dado $x \in (0, 1]$, podemos obter heurísticamente de (3.9) que³

$$\sum_{k=0}^{\lfloor nx \rfloor} \mathbf{P}(T_{\alpha,n} = k) \approx \frac{1}{B(\alpha, \alpha)} \sum_{k=0}^{\lfloor nx \rfloor} \frac{1}{n} \left(\frac{k}{n}\right)^{\alpha-1} \left(1 - \frac{k}{n}\right)^{\alpha-1}, \quad (3.13)$$

ou seja,

$$\mathbf{P}(T_{\alpha,n} \leq nx) \approx \frac{x^{2\alpha-1}}{B(\alpha, \alpha)} \sum_{k=0}^{\lfloor nx \rfloor} \frac{1}{nx} \left(\frac{k}{nx}\right)^{\alpha-1} \left(\frac{1}{x} - \frac{k}{nx}\right)^{\alpha-1}. \quad (3.14)$$

Tomando o limite $n \rightarrow \infty$, o somatório do lado direito aproxima-se de uma integral⁴ e, desta maneira, temos heurísticamente que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}(T_{\alpha,n} \leq nx) = \frac{x^{2\alpha-1}}{B(\alpha, \alpha)} \int_0^1 t^{\alpha-1} \left(\frac{1}{y} - t\right)^{\alpha-1} dt. \quad (3.15)$$

Fazendo a mudança de variáveis $y = xt$, obtemos o seguinte teorema do limite:⁵
Para todo $\alpha > 0$, tem-se que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}(T_{\alpha,n} \leq nx) = \int_{-\infty}^x f_{\alpha}(y) dy, \quad -\infty \leq x \leq \infty, \quad (3.16)$$

onde

$$f_{\alpha}(y) := \begin{cases} \frac{y^{\alpha-1}(1-y)^{\alpha-1}}{B(\alpha, \alpha)} & \text{se } y \in (0, 1) \\ 0 & \text{se } y \notin (0, 1). \end{cases} \quad (3.17)$$

³Se para todo inteiro k fixado se tem que $a_{k,n} \sim b_{k,n}$ quando $n \rightarrow \infty$, em geral não se tem que $\sum_{k=0}^n a_{k,n} \sim \sum_{k=0}^n b_{k,n}$ nem $\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^n a_{k,n} = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^n b_{k,n}$. Por exemplo, se $a_{k,n} = k/n^2$ e $b_{k,n} = k/n^2 + k^2/n^3$, temos que $a_{k,n} \sim b_{k,n}$ mas $\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^n a_{k,n} = 1/2$ e $\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^n b_{k,n} = 5/6$.

⁴Pode-se verificar que

$$\sum_{k=0}^{\lfloor nx \rfloor} \left(\frac{1}{\lfloor nx \rfloor} - \frac{1}{nx}\right) \left(\frac{k}{nx}\right)^{\alpha-1} \left(\frac{1}{x} - \frac{k}{nx}\right)^{\alpha-1} \leq \left(\frac{1}{4x}\right)^{2(\alpha-1)} \sum_{k=0}^{\lfloor nx \rfloor} \left(\frac{1}{\lfloor nx \rfloor} - \frac{1}{nx}\right).$$

Como o lado direito desta desigualdade tende a zero quando $n \rightarrow \infty$, o lado esquerdo também. Isto justifica o fato de a série do lado direito de (3.14) convergir a uma integral quando $n \rightarrow \infty$.

⁵Este teorema foi encontrado utilizando argumentos heurísticos. A prova deste teorema encontra-se no final da seção.

é a densidade beta com ambos parâmetros iguais a α .

Em palavras, (3.16) diz que a distribuição de $T_{\alpha,n}/n$ converge a uma distribuição beta quando $n \rightarrow \infty$. Segue deste teorema que, se $0 < x < 1/2$, $\mathbf{P}(T_{\alpha,n} \leq nx) \not\rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$, ou seja, existem grandes desvios cujas probabilidades não decaem a zero quando $n \rightarrow \infty$ (não se tornam eventos raros). Isto quer dizer que a sequência $X_{\alpha,1}, X_{\alpha,2}, \dots$ não obedece a lei dos grandes números.

Como corolário de (3.16) temos que, se $\alpha > 1$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}(M_{\alpha,n} \leq ny) = \int_{-\infty}^y g_{q,\beta}(x) dx, \quad -\infty \leq y \leq \infty, \quad (3.18)$$

onde q e β foram definidos em (3.11). Com efeito, dado $y \in [-1/2, 1/2]$, utilizando (3.16), temos que

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}(M_{\alpha,n} \leq ny) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}\left(T_{\alpha,n} \leq ny + \frac{n}{2}\right) \\ &= \frac{1}{B(\alpha, \alpha)} \int_0^{y+1/2} t^{\alpha-1} (1-t)^{\alpha-1} dt. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Fazendo a mudança de variáveis $x = t + 1/2$, temos que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}(M_{\alpha,n} \leq ny) = \frac{1}{B(\alpha, \alpha)} \int_{-1/2}^y \left(\frac{1}{4} - x^2\right)^{\alpha-1} dx, \quad (3.20)$$

de onde, de forma completamente análoga a quando obtivemos (3.12), podemos obter (3.18).

De (3.1), pode ser intuído a partir da simetria da função beta que⁶

$$\mathbf{P}(T_{\alpha,n} \geq n - nx) = \mathbf{P}(T_{\alpha,n} \leq nx), \quad 0 \leq x \leq 1. \quad (3.21)$$

Segue daqui que, dado $y \in [0, 1/2]$,

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(M_{\alpha,n} > ny) &= \mathbf{P}\left(T_{\alpha,n} > ny + \frac{n}{2}\right) \\ &= 1 - \mathbf{P}\left(T_{\alpha,n} \leq ny + \frac{n}{2}\right) \\ &= 1 - \mathbf{P}\left(T_{\alpha,n} \geq -ny + \frac{n}{2}\right) \\ &= \mathbf{P}(M_{\alpha,n} < -ny). \end{aligned} \quad (3.22)$$

Logo,

$$\begin{aligned} \mathbf{P}\left(\left|\frac{M_{\alpha,n}}{n}\right| > y\right) &= \mathbf{P}(M_{\alpha,n} > ny) + \mathbf{P}(M_{\alpha,n} < -ny) \\ &= 2\mathbf{P}(M_{\alpha,n} > ny) \\ &= 2 - 2\mathbf{P}(M_{\alpha,n} \leq ny). \end{aligned} \quad (3.23)$$

⁶A prova de (3.21) segue quase as mesmas linhas da prova de (2.36) dada no final da seção 2.3.

Portanto, segue de (3.16) que, se $\alpha > 1$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P} \left(\left| \frac{M_{\alpha,n}}{n} \right| > y \right) = 2 - 2 \int_{-\infty}^y g_{q,\beta}(x) dx, \quad (3.24)$$

onde q e β foram definidos em (3.11). Se $0 < y < 1/2$, o lado direito desta equação pertence ao intervalo $(0, 1)$, ou seja, tem-se que

$$0 < \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P} \left(\left| \frac{M_{\alpha,n}}{n} \right| > y \right) < 1, \quad 0 < y < 1/2. \quad (3.25)$$

No sistema de n spins que temos considerado, a magnetização por partícula é zero, pois $\mathbf{E}(M_{\alpha,n}/n) = 0$. Porém, (3.25) nos diz que há probabilidade positiva de se ter uma média aritmética de momentos magnéticos diferente de zero. Na mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs é comum se substituir uma variável aleatória pelo seu valor esperado; por exemplo, para se mostrar a equivalência dos ensembles microcanônico e canônico [1, 69, 70]. No entanto, no nosso sistema de spins, esta substituição vai trazer resultados distintos. Isto deve ser consequência do fato dos spins estarem fortemente correlacionados.

Demonstração de (3.16). Uma forma simples de provar (3.16) é utilizando a lei dos grandes números e o seguinte teorema, que é um dos resultados mais notáveis da teoria da integração [71]:

Teorema da convergência dominada. *Seja $(f_n)_{n \geq 1}$ uma sequência de funções reais (mensuráveis) definidas em \mathbb{R} tal que $f_n(x) \rightarrow f(x)$ para quase todo $x \in \mathbb{R}$. Se existe uma função integrável (à Lebesgue) g tal que $|f_n(x)| \leq g(x)$ para todo $n \in \mathbb{N}$ e todo $x \in \mathbb{R}$, então f é integrável (à Lebesgue) e*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_n(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx.$$

Em particular, o teorema da convergência dominada se aplica se se cumprem as seguintes condições:

- a) $f_n(x) \rightarrow f(x)$ para todo $x \in \mathbb{R}$ com exceção de um número finito de valores;
- b) f é integrável (talvez impropriamente) à Riemann;
- c) existe uma função g integrável (talvez impropriamente) à Riemann tal que $|f_n(x)| \leq g(x)$ para todo $n \in \mathbb{N}$ e todo $x \in \mathbb{R}$.

Vejamos agora a demonstração de (3.16). Dado $x \in [0, 1]$, utilizando (1.6) em (3.1), temos que

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(T_{\alpha,n} \leq nx) &= \sum_{k=0}^{\lfloor nx \rfloor} \binom{n}{k} \int_0^1 \frac{p^{\alpha-1+k}(1-p)^{\alpha-1+n-k}}{B(\alpha, \alpha)} dp \\ &= \int_0^1 \left(\sum_{k=0}^{\lfloor nx \rfloor} \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \right) \frac{p^{\alpha-1}(1-p)^{\alpha-1}}{B(\alpha, \alpha)} dp. \end{aligned} \quad (3.26)$$

O termo entre colchetes pode ser interpretado como $\mathbf{P}(S_n \leq nx)$, onde $S_n = X_1 + \dots + X_n$ e X_1, X_2, \dots são variáveis aleatórias independentes tais que $\mathbf{P}(X_n = 1) = p$ e $\mathbf{P}(X_n = 0) = 1 - p$. Como a sequência X_1, X_2, \dots obedece a lei dos grandes números e $\mathbf{E}X_1 = p$, segue que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}(S_n \leq nx) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^{\lfloor nx \rfloor} \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} = \begin{cases} 1 & \text{se } p < x \\ 0 & \text{se } p > x. \end{cases} \quad (3.27)$$

Por outro lado, temos que

$$\left(\sum_{k=0}^{\lfloor nx \rfloor} \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \right) \frac{p^{\alpha-1} (1-p)^{\alpha-1}}{B(\alpha, \alpha)} \leq \frac{p^{\alpha-1} (1-p)^{\alpha-1}}{B(\alpha, \alpha)}, \quad (3.28)$$

onde a expressão do lado direito é integrável. Logo, pelo teorema da convergência dominada, obtemos que

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}(T_{\alpha, n} \leq nx) &= \int_0^1 \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^{\lfloor nx \rfloor} \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \frac{p^{\alpha-1} (1-p)^{\alpha-1}}{B(\alpha, \alpha)} dp \\ &= \frac{1}{B(\alpha, \alpha)} \int_0^x p^{\alpha-1} (1-p)^{\alpha-1} dp. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Isto termina a prova.

3.4 Expressões assintóticas

Na seção anterior vimos que, dado $x \in (0, 1]$, $\mathbf{P}(T_{\alpha, n} \leq nx)$ converge a um limite não nulo quando $n \rightarrow \infty$. Nesta seção estamos interessados em estimar a rapidez desta convergência, ou seja, queremos estudar o comportamento da função

$$\Delta_{\alpha, x}(n) = \mathbf{P}(T_{\alpha, n} \leq nx) - F_{\alpha}(x), \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (3.30)$$

para valores grandes de n , onde

$$F_{\alpha}(x) = \frac{1}{B(\alpha, \alpha)} \int_0^x y^{\alpha-1} (1-y)^{\alpha-1} dy. \quad (3.31)$$

Para isto, vamos analisar vários casos particulares. Vamos ver que, se $\alpha > 0$ é inteiro, é conveniente considerar uma extensão da função $\Delta_{\alpha, x}$ ao intervalo $[0, \infty)$,⁷ pois isto vai facilitar a obtenção analítica de cotas superior e inferior desta função (ver subseções 3.4.2, 3.4.3 e 3.4.4).

⁷Sejam os conjuntos A e B com $A \subset B$ e seja f uma função definida em A . Diz-se que uma função \bar{f} definida em B é uma *extensão* de f ao conjunto B se $\bar{f}(x) = f(x)$ para todo $x \in A$.

3.4.1 Caso $x = 0$

Usando (3.30), (3.31), (3.1) e as identidades (3.4), obtemos que

$$\Delta_{\alpha,0}(n) = \frac{\Gamma(2\alpha)\Gamma(\alpha+n)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(2\alpha+n)}, \quad \alpha > 0, n = 1, 2, \dots \quad (3.32)$$

A fórmula de Stirling para a função gama estabelece que [72]

$$\Gamma(x) \sim \sqrt{2\pi}x^{x-1/2}e^{-x}. \quad (3.33)$$

Utilizando isto, temos que

$$\begin{aligned} \frac{n^\alpha\Gamma(\alpha+n)}{\Gamma(2\alpha+n)} &\sim \frac{\sqrt{2\pi}(\alpha+n)^{\alpha+n-1/2}e^{-\alpha-n}n^\alpha}{\sqrt{2\pi}(2\alpha+n)^{2\alpha+n-1/2}e^{-2\alpha-n}} \\ &= \frac{(\alpha+n)^{\alpha+n-1/2}}{(2\alpha+n)^{2\alpha+n-1/2}}n^\alpha e^\alpha \\ &= \left(\frac{1+\alpha/n}{1+2\alpha/n}\right)^n \frac{(1+\alpha/n)^{\alpha-1/2}}{(1+2\alpha/n)^{2\alpha-1/2}}e^\alpha. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Lembrando que $(1+x/n)^n \rightarrow e^x$ quando $n \rightarrow \infty$ [51], obtemos que a expressão do lado direito converge a 1 quando $n \rightarrow \infty$. Desta maneira, temos provado que

$$\Delta_{\alpha,0}(n) \sim \frac{\Gamma(2\alpha)}{\Gamma(\alpha)} \frac{1}{n^\alpha}, \quad \alpha > 0. \quad (3.35)$$

Se $\alpha > 0$ é inteiro, podemos encontrar analiticamente a expressão do termo subdominante de $\Delta_{\alpha,0}(n)$. Com efeito, segue de (3.32) e do uso das identidades (3.4) que

$$\begin{aligned} n^{\alpha+1} \left(\Delta_{\alpha,0}(n) - \frac{\Gamma(2\alpha)}{\Gamma(\alpha)} \frac{1}{n^\alpha} \right) &= \frac{\Gamma(2\alpha)}{\Gamma(\alpha)} \left(\frac{n^{\alpha+1}\Gamma(\alpha+n)}{\Gamma(2\alpha+n)} - n \right) \\ &= \frac{\Gamma(2\alpha)}{\Gamma(\alpha)} \frac{n^{\alpha+1} - n \prod_{i=\alpha}^{2\alpha-1} (n+i)}{\prod_{i=\alpha}^{2\alpha-1} (n+i)}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Multiplicando e dividindo por $\prod_{i=1}^{\alpha-1} (n+i)$, temos que

$$n^{\alpha+1} \left(\Delta_{\alpha,0}(n) - \frac{\Gamma(2\alpha)}{\Gamma(\alpha)} \frac{1}{n^\alpha} \right) = \frac{\Gamma(2\alpha)}{\Gamma(\alpha)} \frac{n^{\alpha+1} \prod_{i=1}^{\alpha-1} (n+i) - n \prod_{j=1}^{2\alpha-1} (n+j)}{\prod_{i=1}^{2\alpha-1} (n+i)}. \quad (3.37)$$

Ora, pode-se provar facilmente por indução que, para todo x real,

$$\prod_{i=1}^l (x+i) = x^l + \frac{l(l+1)}{2}x^{l-1} + o(x^{l-1}), \quad l = 1, 2, \dots \quad (3.38)$$

Logo, se $\alpha > 1$, usando (3.38) em (3.37), obtemos que

$$n^{\alpha+1} \left(\Delta_{\alpha,0}(n) - \frac{\Gamma(2\alpha)}{\Gamma(\alpha)} \frac{1}{n^\alpha} \right) = \frac{\Gamma(2\alpha)}{\Gamma(\alpha)} \frac{\alpha(1-3\alpha)n^{2\alpha-1} + o(n^{2\alpha-1})}{2 \prod_{i=1}^{2\alpha-1} (n+i)}. \quad (3.39)$$

Portanto,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{\alpha+1} \left(\Delta_{\alpha,0}(n) - \frac{\Gamma(2\alpha)}{\Gamma(\alpha)} \frac{1}{n^\alpha} \right) = \frac{\alpha(1-3\alpha)}{2} \frac{\Gamma(2\alpha)}{\Gamma(\alpha)} \quad (3.40)$$

para $\alpha = 2, 3, \dots$. Se $\alpha = 1$, segue de (3.37) que

$$n^2 \left(\Delta_{1,0}(n) - \frac{1}{n} \right) = \frac{n^2 - n(n+1)}{n+1} \rightarrow -1, \quad n \rightarrow \infty, \quad (3.41)$$

ou seja, (3.40) também vale quando $\alpha = 1$. Portanto, temos que

$$\Delta_{\alpha,0}(n) - \frac{\Gamma(2\alpha)}{\Gamma(\alpha)} \frac{1}{n^\alpha} \sim \frac{\alpha(1-3\alpha)}{2} \frac{\Gamma(2\alpha)}{\Gamma(\alpha)} \frac{1}{n^{\alpha+1}}, \quad \alpha = 1, 2, \dots \quad (3.42)$$

Um estudo numérico sugere que (3.42) se cumpre mesmo para valores não-inteiros de $\alpha > 0$ (por exemplo, veja a figura 3.1 para $\alpha = 1/2$). Desta maneira, teríamos que

$$\Delta_{\alpha,0}(n) = \frac{\Gamma(2\alpha)}{\Gamma(\alpha)} \frac{1}{n^\alpha} \left(1 - \frac{\alpha(3\alpha-1)}{2n} + o(n^{-1}) \right), \quad \alpha > 0. \quad (3.43)$$

Segue formalmente da definição da q -exponencial (ver (1.2)) que

$$ae_q^{-nb} = \frac{a}{[(q-1)nb]^{1/(q-1)}} \left(1 + \frac{1}{(q-1)nb} \right)^{-1/(q-1)}, \quad q > 1. \quad (3.44)$$

Logo, utilizando a fórmula de Taylor [51], temos que

$$ae_q^{-nb} = \frac{a}{[(q-1)nb]^{1/(q-1)}} \left(1 - \frac{1}{(q-1)nb} + o(n^{-1}) \right). \quad (3.45)$$

Comparando (3.43) e (3.45), obtemos que

$$\Delta_{\alpha,0}(n) = a_\alpha e_{q'}^{-nb_\alpha} + o(n^{-\alpha-1}), \quad (3.46)$$

onde

$$q' = 1 + \frac{1}{\alpha}, \quad a_\alpha = \frac{2^\alpha}{(3\alpha-1)^\alpha} \frac{\Gamma(2\alpha)}{\Gamma(\alpha)} \quad \text{e} \quad b_\alpha = \frac{2\alpha}{3\alpha-1}. \quad (3.47)$$

A relação (3.18) diz que a distribuição de $M_{\alpha,n}/n$ (média aritmética de momentos magnéticos) converge a uma distribuição q -gaussiana com parâmetros $q < 1$ e $\beta > 0$, dados por (3.11). Ora, de (3.47), podemos obter imediatamente a seguinte relação entre q e q' :

$$\frac{1}{q'-1} = \frac{1}{1-q} + 1. \quad (3.48)$$

Esta relação é muito parecida à relação análoga (2.32).

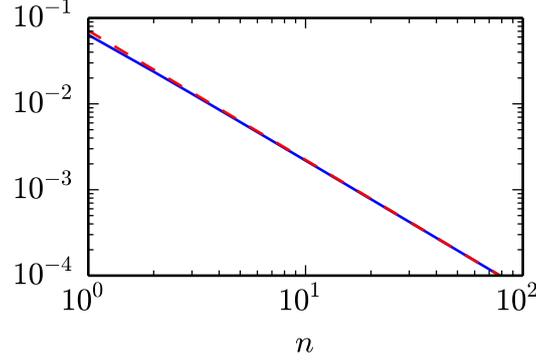


Figura 3.1: O gráfico mostra que $(\pi n)^{-1/2} - \Delta_{1/2,0}(n)$ (linha sólida) é assintoticamente equivalente à lei de potência $(8\sqrt{\pi})^{-1}n^{-3/2}$ (linha quebrada). Desta maneira, temos que $\Delta_{1/2,0}(n) \approx (n\pi)^{-1/2}[1 - (8n)^{-1}]$, o qual está de acordo com (3.43).

3.4.2 Caso $\alpha = 1$

Dados $\alpha > 0$ e $x \in [0, 1]$, segue de (3.30), (3.1) e do uso das identidades (3.4) que, para cada $n \in \mathbb{N}$,

$$\begin{aligned} \Delta_{\alpha,x}(n) &= \sum_{k=0}^{\lfloor nx \rfloor} \binom{n}{k} \frac{\Gamma(\alpha+k)\Gamma(\alpha+n-k)}{\Gamma(2\alpha+n)} \frac{\Gamma(2\alpha)}{[\Gamma(\alpha)]^2} - F_{\alpha}(x) \\ &= \frac{\Gamma(2\alpha)}{[\Gamma(\alpha)]^2} \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+2\alpha)} \sum_{k=0}^{\lfloor nx \rfloor} \frac{\Gamma(k+\alpha)}{\Gamma(k+1)} \frac{\Gamma(n-k+\alpha)}{\Gamma(n-k+1)} - F_{\alpha}(x). \end{aligned} \quad (3.49)$$

No caso particular em que α é inteiro, segue que

$$\Delta_{\alpha,x}(n) = \frac{(2\alpha-1)!}{[(\alpha-1)!]^2} \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+2\alpha)} \sum_{k=0}^{\lfloor nx \rfloor} \prod_{i=1}^{\alpha-1} (k+i)(n-k+i) - F_{\alpha}(x). \quad (3.50)$$

O lado direito de (3.50) está bem definido mesmo se n é um número real não negativo. Conseqüentemente, definimos a função $\bar{\Delta}_{\alpha,x} : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ igualando o lado direito de (3.50) a $\bar{\Delta}_{\alpha,x}(n)$ para todo $n \geq 0$. É claro que a função $\bar{\Delta}_{\alpha,x}$ assim definida é uma extensão da função $\Delta_{\alpha,x}$ ao intervalo $[0, \infty)$.

Se $\alpha = 1$, segue imediatamente de (3.31) que $F_1(x) = x$ para todo $x \in [0, 1]$. Logo, de (3.50), obtemos que

$$\bar{\Delta}_{1,x}(n) = \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+2)} (\lfloor nx \rfloor + 1) - x = \frac{\lfloor nx \rfloor + 1}{n+1} - x, \quad n \geq 0. \quad (3.51)$$

Utilizando o fato de que $\lfloor nx \rfloor \leq nx < \lfloor nx \rfloor + 1$, temos que

$$-\frac{x}{n+1} < \bar{\Delta}_{1,x}(n) \leq \frac{1-x}{n+1}. \quad (3.52)$$

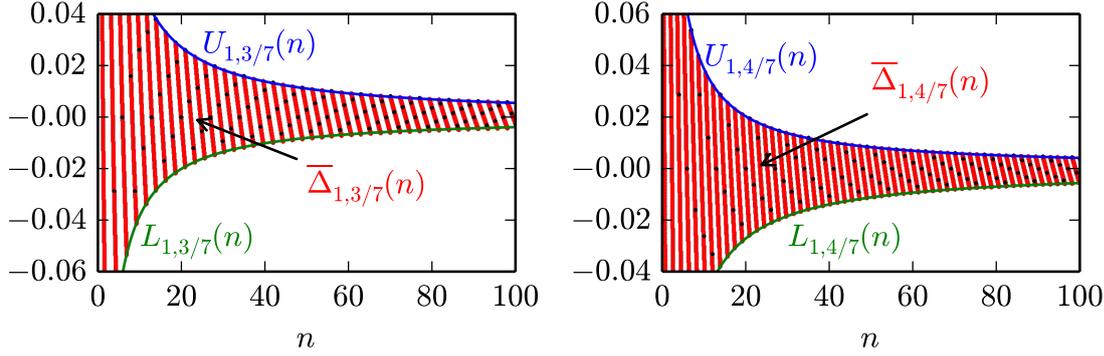


Figura 3.2: Gráficos da função $\bar{\Delta}_{1,x}$, definida em (3.57), com suas cotas superior $U_{1,x}$ e inferior $L_{1,x}$ para dois valores de x . (Esquerda) $x = 3/7$ (Direita) $x = 4/7$. Em ambas as figuras, os pontos representam a função $\Delta_{1,x}$. Verificam-se as relações $U_{1,4/7} = -L_{1,3/7}$ e $L_{1,4/7} = -U_{1,3/7}$.

Isto significa que as funções

$$U_{1,x}(n) = \frac{1-x}{n+1} = (1-x)e_2^{-n} \quad \text{e} \quad L_{1,x}(n) = -\frac{x}{n+1} = -xe_2^{-n} \quad (3.53)$$

são tais que $L_{1,x}(n) < \bar{\Delta}_{1,x}(n) \leq U_{1,x}(n)$ para todo $n \geq 0$ (ver figura 3.2). Em outras palavras, as funções $U_{1,x}$ e $L_{1,x}$ são cotas superior e inferior da função $\bar{\Delta}_{1,x}$ (e, portanto, também da função $\Delta_{1,x}$), respectivamente. Além disso, as funções $U_{1,x}$ e $L_{1,x}$ são monótonas e cumprem a relação $L_{1,x} = -U_{1,1-x}$ para todo $x \in [0, 1]$.

3.4.3 Caso $\alpha = 2$

Dado $x \in [0, 1]$, segue de (3.31) que

$$F_2(x) = 6 \int_0^x y(1-y) dy = 3x^2 - 2x^3. \quad (3.54)$$

Logo, de (3.50) obtemos que

$$\begin{aligned} \bar{\Delta}_{2,x}(n) &= 6 \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+4)} \sum_{k=0}^{\lfloor nx \rfloor} (k+1)(n-k+1) - (3x^2 - 2x^3) \\ &= \frac{6 \sum_{k=0}^{\lfloor nx \rfloor} (k+1)}{(n+2)(n+3)} - \frac{6 \sum_{k=0}^{\lfloor nx \rfloor} k(k+1)}{(n+1)(n+2)(n+3)} - (3x^2 - 2x^3) \end{aligned} \quad (3.55)$$

para todo $n \geq 0$. Utilizando as relações

$$\sum_{i=1}^l i = \frac{l(l+1)}{2} \quad \text{e} \quad \sum_{i=1}^l i(i+1) = \frac{l(l+1)(l+2)}{3}, \quad l = 1, 2, \dots, \quad (3.56)$$

as quais podem ser provadas facilmente por indução, obtemos que

$$\bar{\Delta}_{2,x}(n) = \frac{3(\lfloor nx \rfloor + 1)(\lfloor nx \rfloor + 2)}{(n+2)(n+3)} - \frac{2\lfloor nx \rfloor(\lfloor nx \rfloor + 1)(\lfloor nx \rfloor + 2)}{(n+1)(n+2)(n+3)} - (3x^2 - 2x^3) \quad (3.57)$$

para todo $n \geq 0$.

Se $x \neq 0$, o gráfico da função $\bar{\Delta}_{2,x}$ (ver figura 3.3) ilustra que esta função é estritamente decrescente em cada intervalo $[i/x, (i+1)/x)$, onde $i = 0, 1, 2, \dots$. Por conseguinte,

$$\sup_{i/x \leq n < (i+1)/x} \bar{\Delta}_{2,x}(n) = \bar{\Delta}_{2,x}(i/x) \quad (3.58)$$

e

$$\inf_{i/x \leq n < (i+1)/x} \bar{\Delta}_{2,x}(n) = \lim_{\substack{n \rightarrow (i+1)/x \\ n < (i+1)/x}} \bar{\Delta}_{2,x}(n). \quad (3.59)$$

Definindo as funções

$$U_{2,x}(n) = \frac{3(nx+1)(nx+2)}{(n+2)(n+3)} - \frac{2nx(nx+1)(nx+2)}{(n+1)(n+2)(n+3)} - (3x^2 - 2x^3) \quad (3.60)$$

e

$$L_{2,x}(n) = \frac{3nx(nx+1)}{(n+2)(n+3)} - \frac{2nx(nx-1)(nx+1)}{(n+1)(n+2)(n+3)} - (3x^2 - 2x^3), \quad (3.61)$$

temos que

$$U_{2,x}(i/x) = \sup_{i/x \leq n < (i+1)/x} \bar{\Delta}_{2,x}(n) \quad (3.62)$$

e

$$L_{2,x}(i/x) = \inf_{i/x \leq n < (i+1)/x} \bar{\Delta}_{2,x}(n). \quad (3.63)$$

Além disso, a figura 3.3 mostra que as funções $U_{2,x}$ e $L_{2,x}$ são cotas superior e inferior da função $\bar{\Delta}_{2,x}$ respectivamente; ou seja, tem-se que $L_{2,x}(n) \leq \bar{\Delta}_{2,x}(n) \leq U_{2,x}(n)$ para todo $n \geq 0$. A figura 3.3 também sugere que se cumpre a relação $L_{2,x} = -U_{2,1-x}$. De fato, isto pode ser verificado analiticamente para todo $x \in [0, 1]$ utilizando um *software* de computação simbólica (por exemplo *Mathematica*).

Vemos imediatamente das definições das funções $U_{2,x}$ e $L_{2,x}$ que elas não são proporcionais a q -exponenciais. Porém, utilizando um *software* de computação simbólica, obtemos que

$$U_{2,x}(n) = \frac{9x - 21x^2 + 12x^3}{n} + \frac{6 - 49x + 93x^2 - 50x^3}{n^2} + o(n^{-2}) \quad (3.64)$$

e

$$L_{2,x}(n) = \frac{3x - 15x^2 + 12x^3}{n} - \frac{13x - 57x^2 + 50x^3}{n^2} + o(n^{-2}). \quad (3.65)$$

Logo, escolhendo convenientemente $a_U(x)$, $b_U(x)$, $a_L(x)$ e $b_L(x)$, podemos obter que

$$U_{2,x}(n) = a_U(x)e_2^{-nb_U(x)} + o(n^{-2}) \quad (3.66)$$

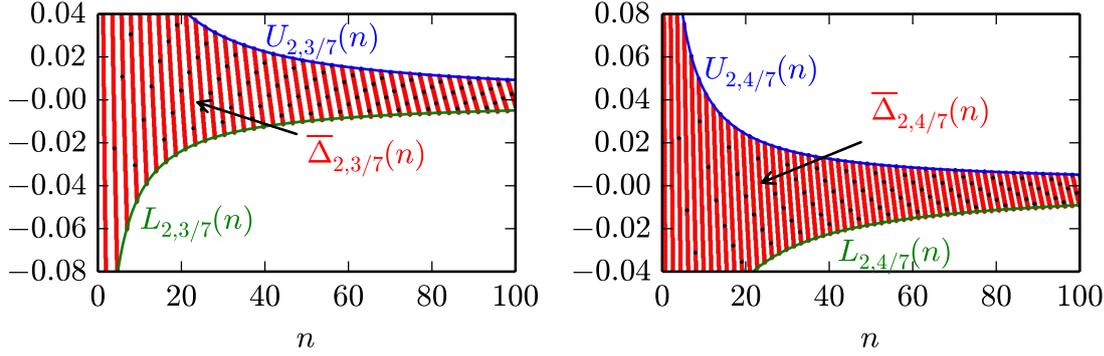


Figura 3.3: Gráficos da função $\bar{\Delta}_{2,x}$, definida em (3.57), com suas cotas superior $U_{2,x}$ e inferior $L_{2,x}$ para dois valores de x . (Esquerda) $x = 3/7$ (Direita) $x = 4/7$. Em ambas as figuras, os pontos representam a função $\Delta_{2,x}$. Verifica-se as relações $U_{2,4/7} = -L_{2,3/7}$ e $L_{2,4/7} = -U_{2,3/7}$.

e

$$L_{2,x}(n) = -a_L(x)e_2^{-nb_L(x)} + o(n^{-2}) \quad (3.67)$$

para todo $x \in [0, 1]$, com exceção de um número finito de valores. Além disso, segue de (3.64) e (3.65) que $U_{2,x}(n)$ e $L_{2,x}(n)$ são funções monótonas de n quando n é suficientemente grande.

Digressão sobre a monotonicidade das funções $U_{2,x}$ e $L_{2,x}$. As funções $U_{2,x}$ e $L_{2,x}$ são racionais⁸ e, por conseguinte, são infinitamente diferenciáveis em seus respectivos domínios. Além disso, existem números reais a e b tais que os intervalos (a, ∞) e (b, ∞) estão contidos nos domínios de $U_{2,x}$ e $L_{2,x}$ respectivamente. Segue de (3.64) que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{nU_{2,x}(n)}{c(x)} = 1, \quad c(x) = 9x - 21x^2 + 12x^3, \quad x \neq 0, \frac{3}{4}, 1. \quad (3.68)$$

Isto quer dizer que, para n suficientemente grande,

$$\frac{c(x)}{n} - \epsilon \frac{|c(x)|}{n} < U_{2,x}(n) < \frac{c(x)}{n} + \epsilon \frac{|c(x)|}{n}, \quad \epsilon > 0. \quad (3.69)$$

Ora, como $U_{2,x}$ é uma função racional, a equação $U'_{2,x}(n) = 0$ não tem solução ou possui um número finito de soluções. Seja n_0 a maior raiz desta equação e ponhamos $n_0 = -\infty$ no caso em que não exista solução. Se $n_{\max} = \max\{a, n_0\}$ e $c(x) > 0$, deve-se ter $U'_{2,x}(n) < 0$ para todo $n > n_{\max}$. Com efeito, se tivéssemos $U'_{2,x}(n_1) > 0$ para algum $n_1 > n_{\max} \geq n_0$, então, pela definição de n_0 e pelo fato da derivada ter a propriedade do valor intermediário [55], teríamos que $U'_{2,x}(n) > 0$ para todo $n \geq n_1$, ou seja, a função $U_{2,x}$ seria monótona crescente no intervalo $[n_1, \infty)$. Além

⁸Uma função é racional se pode ser escrita como a divisão de dois polinômios.

disso, tomando $\epsilon = 1/2$ em (3.69), teríamos que $U_{2,x}(n_2) > c(x)/(2n_2) > 0$ para algum $n_2 > n_1$. Portanto, teríamos que $U_{2,x}(n) \geq U_{2,x}(n_2) > 0$ para todo $n \geq n_2$, o qual contradiria o fato de que $U_{2,x}(n) \rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$. Desta maneira, temos provado que, se $c(x) > 0$ ($c(x) < 0$), $U_{2,x}(n)$ é uma função monótona crescente (decrescente) de n quando n é suficientemente grande. Um resultado análogo pode ser provado para a função $L_{2,x}(n)$.

3.4.4 Caso α inteiro

Nas subseções 3.4.2 e 3.4.3, encontramos analiticamente cotas superiores e inferiores das funções $\bar{\Delta}_{1,x}(n)$ e $\bar{\Delta}_{2,x}(n)$ respectivamente. Vimos que, para quase todo $x \in (0, 1]$, estas cotas se aproximam de zero como uma lei de potência da forma $1/n$ com um termo subdominante da forma $1/n^2$. Nesta seção, descrevemos um procedimento sistemático para obter analiticamente cotas superiores e inferiores da função $\bar{\Delta}_{\alpha,x}(n)$ quando $\alpha = 3, 4, \dots$. Vamos ver que, para quase todo $x \in (0, 1]$, estas cotas convergem a zero como uma lei de potência da forma $1/n$, independentemente do valor de α .

Os passos do procedimento são os seguintes:

- a) Encontrar a expressão fechada de $\bar{\Delta}_{\alpha,x}(n)$; por exemplo, utilizando um *software* de computação simbólica.
- b) Substituir todos os termos $\lfloor nx \rfloor$ por nx na expressão fechada de $\bar{\Delta}_{\alpha,x}(n)$. Isto vai nos dar a expressão da cota superior de $\bar{\Delta}_{\alpha,x}(n)$, a qual denotaremos por $U_{\alpha,x}(n)$.
- c) Substituir todos os termos $\lfloor nx \rfloor$ por $nx - 1$ na expressão fechada de $\bar{\Delta}_{\alpha,x}(n)$. Isto vai nos dar a expressão da cota inferior de $\bar{\Delta}_{\alpha,x}(n)$, a qual denotaremos por $L_{\alpha,x}(n)$.

O primeiro passo do procedimento é sempre possível de se realizar, pois a definição de $\bar{\Delta}_{\alpha,x}(n)$ dada pelo lado direito de (3.50) só envolve somas de potências dos primeiros $\lfloor nx \rfloor$ inteiros positivos, as quais sempre possuem expressões fechadas (ver (3.51) e (3.57) como exemplos) [73]. Os dois passos restantes dependem da hipótese (provavelmente correta) de que a função $\bar{\Delta}_{\alpha,x}$ é monótona decrescente em cada intervalo $[i/x, (i+1)/x)$, onde $i = 0, 1, 2, \dots$. Esta hipótese foi verificada nos casos $\alpha = 1$ (analiticamente) e $\alpha = 2$ (numericamente). A figura 3.4 ilustra que esta hipótese também se verifica nos casos $\alpha = 3$ e $\alpha = 10$.

Usando o procedimento mencionado, encontramos que $U_{\alpha,x}(n)$ e $L_{\alpha,x}(n)$ são funções monótonas de n quando n é suficientemente grande. Além disso, tem-se que $U_{\alpha,x}(n) \rightarrow 0$ e $L_{\alpha,x}(n) \rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$ para todo $\alpha > 0$ inteiro e todo $x \in [0, 1]$.

Agora vamos ilustrar a aplicação do procedimento no caso $\alpha = 3$. Dado $x \in (0, 1]$,

podemos obter de (3.50), utilizando um *software* de computação simbólica, que

$$\begin{aligned} \bar{\Delta}_{3,x}(n) = & \frac{(\lfloor nx \rfloor + 1)(\lfloor nx \rfloor + 2)(\lfloor nx \rfloor + 3)}{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)(n+5)} \\ & \times [10(n^2 + 3n + 2) - 3(5n + 7)\lfloor nx \rfloor + 6\lfloor nx \rfloor^2] \\ & - 10x^3 + 15x^4 - 6x^5 \quad (3.70) \end{aligned}$$

para todo $n \geq 0$. Logo, segundo o procedimento,

$$\begin{aligned} U_{3,x}(n) = & \frac{(nx+1)(nx+2)(nx+3)}{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)(n+5)} \\ & \times [10(n^2 + 3n + 2) - 3(5n + 7)nx + 6(nx)^2] \\ & - 10x^3 + 15x^4 - 6x^5. \quad (3.71) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} L_{3,x}(n) = & \frac{nx(nx+1)(nx+2)}{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)(n+5)} \\ & \times [10(n^2 + 3n + 2) - 3(5n + 7)(nx-1) + 6(nx-1)^2] \\ & - 10x^3 + 15x^4 - 6x^5. \quad (3.72) \end{aligned}$$

são cotas superior e inferior de $\bar{\Delta}_{3,x}(n)$ respectivamente. Isto é ilustrado na figura 3.4, que também mostra que $U_{3,x}(n)$ e $L_{3,x}(n)$ decaem a zero como uma lei de potência da forma $1/n$. Utilizando um *software* de computação simbólica podemos encontrar termos subdominantes da forma $1/n^2$ para $U_{3,x}(n)$ e $L_{3,x}(n)$.

O mesmo procedimento pode ser utilizado no caso $\alpha = 10$. Porém, neste caso a expressão fechada de $\bar{\Delta}_{10,x}(n)$ (assim como das suas cotas) é muito longa para ser mostrada aqui. No entanto, obtemos as mesmas conclusões que no caso $\alpha = 3$ (ver figura 3.4).

Digressão sobre o decaimento das funções $U_{\alpha,x}$ e $L_{\alpha,x}$. A relação (3.16) nos garante que $\Delta_{\alpha,x}(n) \rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$ para todo $\alpha > 0$ e todo $x \in [0, 1]$. Porém, isto não é suficiente para concluirmos que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \bar{\Delta}_{\alpha,x}(n) = 0, \quad \alpha = 1, 2, \dots, x \in [0, 1]. \quad (3.73)$$

A veracidade desta afirmação é relevante para afirmarmos que as cotas de $\bar{\Delta}_{\alpha,x}(n)$ convergem a zero quando $n \rightarrow \infty$. A prova de (3.73) requer do seguinte lema, que pode ser provado facilmente por indução: *Para cada inteiro positivo l , tem-se que $1^l + \dots + m^l$ é um polinômio em m de grau $l + 1$ com coeficiente líder $1/(l + 1)$. Por conseguinte,*

$$\lim_{y \rightarrow \infty} \frac{1}{y^{l+1}} \sum_{k=0}^{\lfloor y \rfloor} k^l = \frac{1}{l+1}. \quad (3.74)$$

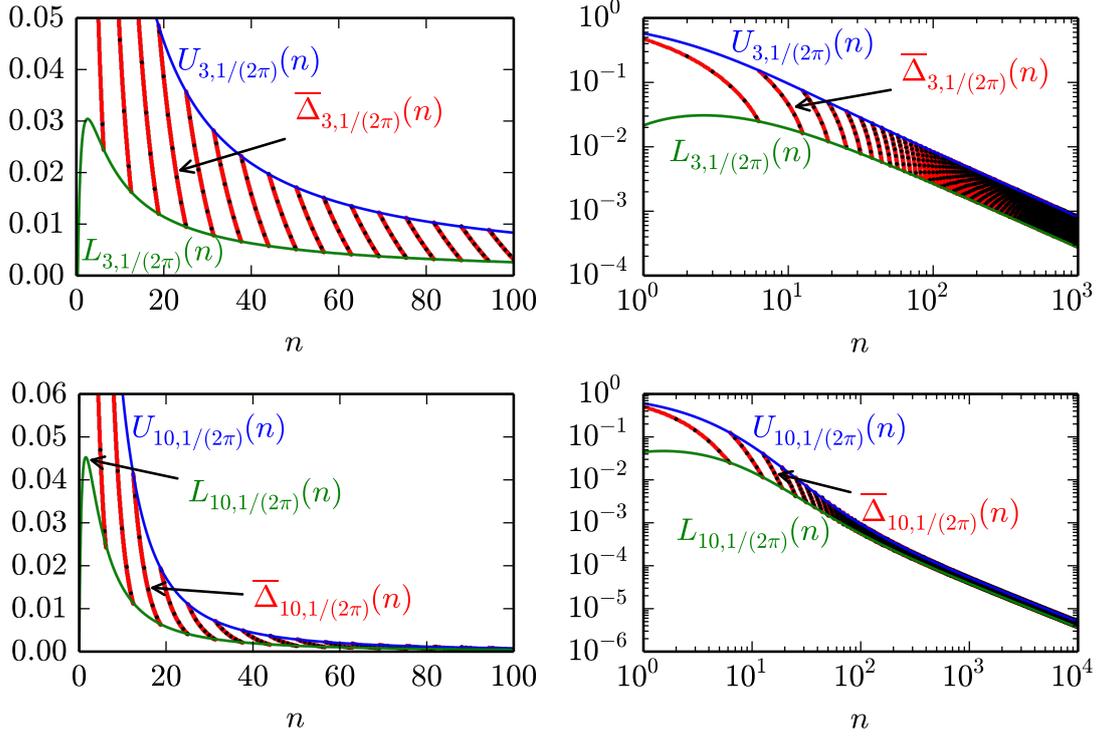


Figura 3.4: Gráficos das funções $\bar{\Delta}_{3,1/(2\pi)}(n)$ (linha de cima) e $\bar{\Delta}_{10,1/(2\pi)}(n)$ (linha de baixo), definidas segundo (3.50), com suas respectivas cotas. Os pontos representam as funções $\Delta_{3,1/(2\pi)}(n)$ e $\Delta_{10,1/(2\pi)}(n)$. A representação Log-Log ilustra o decaimento do tipo lei de potência da forma $1/n$ das cotas das funções $\bar{\Delta}_{3,1/(2\pi)}(n)$ e $\bar{\Delta}_{10,1/(2\pi)}(n)$.

Vejamos então a prova de (3.73). Segue de (3.50) e do lema que

$$\bar{\Delta}_{\alpha,x}(n) + F_{\alpha}(x) \sim \frac{(2\alpha - 1)!}{[(\alpha - 1)!]^2} \frac{1}{n^{2\alpha-1}} \sum_{k=0}^{\lfloor nx \rfloor} k^{\alpha-1} (n-k)^{\alpha-1}. \quad (3.75)$$

Logo, pelo teorema binomial,

$$\bar{\Delta}_{\alpha,x}(n) + F_{\alpha}(x) \sim \frac{(2\alpha - 1)!}{[(\alpha - 1)!]^2} \sum_{j=0}^{\alpha-1} \binom{\alpha-1}{j} \frac{(-1)^j}{n^{\alpha+j}} \sum_{k=0}^{\lfloor nx \rfloor} k^{\alpha+j-1}. \quad (3.76)$$

Ora, pelo lema,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{(2\alpha - 1)!}{[(\alpha - 1)!]^2} \sum_{j=0}^{\alpha-1} \binom{\alpha-1}{j} \frac{(-1)^j}{n^{\alpha+j}} \sum_{k=0}^{\lfloor nx \rfloor} k^{\alpha+j-1} = \frac{(2\alpha - 1)!}{[(\alpha - 1)!]^2} \sum_{j=0}^{\alpha-1} \binom{\alpha-1}{j} \frac{(-1)^j x^{\alpha+j}}{\alpha+j}. \quad (3.77)$$

Portanto,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \bar{\Delta}_{\alpha,x}(n) = \frac{(2\alpha - 1)!}{[(\alpha - 1)!]^2} \sum_{j=0}^{\alpha-1} \binom{\alpha-1}{j} \frac{(-1)^j x^{\alpha+j}}{\alpha+j} - F_{\alpha}(x). \quad (3.78)$$

Por outro lado, segue de (3.31) e do teorema binomial que

$$F_{\alpha}(x) = \frac{(2\alpha - 1)!}{[(\alpha - 1)!]^2} \sum_{j=0}^{\alpha-1} \binom{\alpha-1}{j} \frac{(-1)^j x^{\alpha+j}}{\alpha+j}, \quad \alpha = 1, 2, \dots \quad (3.79)$$

Isto completa a prova.

Os dois últimos passos do procedimento descrito na subseção 3.4.4 nos garantem que $U_{\alpha,x}(n)$ e $L_{2,x}(n)$ são funções racionais de n e, por conseguinte, são funções monótonas de n para n suficientemente grande. Isto junto a (3.73) implicam que $U_{\alpha,x}(n) \rightarrow 0$ e $L_{\alpha,x}(n) \rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$. Com efeito, a prova disto é consequência direta do seguinte lema: *Seja $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ uma função monótona. Se $(x_i)_{i \geq 1}$ é uma sequência tal que $x_i \rightarrow \infty$ e $f(x_i) \rightarrow L$, então $f(x) \rightarrow L$ quando $x \rightarrow \infty$.* Para provar este lema suponhamos que f seja monótona não-decrescente. Dado $\epsilon > 0$, existe $i_0 \in \mathbb{N}$ tal que $L - \epsilon < f(x_i) < L + \epsilon$ para todo inteiro $i \geq i_0$. Logo, para qualquer $x > x_{i_0}$, temos que $L - \epsilon < f(x_{i_0}) \leq f(x)$. Como $x_i \rightarrow \infty$, existe $x_i > x$ para algum inteiro $i \geq i_0$ e, por conseguinte, $L - \epsilon < f(x_{i_0}) \leq f(x) \leq f(x_i) < L + \epsilon$.

3.5 Conclusões

Estudamos o comportamento assintótico da probabilidade de grandes desvios em um modelo probabilístico que envolve uma sequência $X_{\alpha,1}, X_{\alpha,2}, \dots$ de variáveis aleatórias permutáveis fortemente correlacionadas que tomam valores no conjunto $\{0, 1\}$. Neste modelo, a distribuição da soma parcial $T_{\alpha,n} := X_{\alpha,1} + \dots + X_{\alpha,n}$, definida em (3.1), depende de um parâmetro real $\alpha > 0$. Na seção 3.3 mostramos que existem grandes desvios que não se tornam improváveis conforme n cresce. Mais precisamente, mostramos que a distribuição de $T_{\alpha,n}/n$ converge a uma distribuição beta com ambos parâmetros iguais a α . Como consequência disto, a sequência $X_{\alpha,1}, X_{\alpha,2}, \dots$ não obedece a lei dos grandes números. Ainda assim, estudamos a rapidez de convergência da função $\Delta_{\alpha,x}(n) := \mathbf{P}(T_{\alpha,n} \leq nx) - F_{\alpha}(x)$ quando $x \in [0, 1]$, onde $F_{\alpha}(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}(T_{\alpha,n} \leq nx)$. Mostramos que, para $x = 0$ e todo $\alpha > 0$, a função $\Delta_{\alpha,0}(n)$ se aproxima de zero como uma lei de potência, diferente de uma q -exponencial, da forma $1/n^{\alpha}$ com um termo subdominante da forma $1/n^{\alpha+1}$. No entanto, mostramos que a função $\Delta_{\alpha,0}(n)$ pode ser bem aproximada por uma q -exponencial com $q = 1 + 1/\alpha$ da forma $a_{\alpha} e_q^{-nb_{\alpha}}$, onde a_{α} e b_{α} são coeficientes determinados por α . Para α inteiro e para todo $x \in [0, 1]$, encontramos cotas para a função $\Delta_{\alpha,x}(n)$ que se aproximam de zero como leis de potência da forma $1/n$ com um termo subdominante da forma $1/n^2$ para quase todo $x \in [0, 1]$. As cotas da função $\Delta_{\alpha,x}(n)$ podem ser bem aproximadas por q -exponenciais da forma $a_{\alpha,x} e_2^{-nb_{\alpha,x}}$.

Capítulo 4

Mecânica estatística não extensiva

Este capítulo contém uma introdução à mecânica estatística não extensiva com vistas a uma possível aplicação em sistemas clássicos hamiltonianos. A seção 4.1 contém a definição e algumas propriedades da entropia S_q , na qual a mecânica estatística não extensiva está baseada. Nesta seção não escatimamos o rigor. Nas seções posteriores que lidam com a extremização da entropia S_q e o ensemble canônico da mecânica estatística não extensiva, a perda de rigor resulta necessária. Algumas relações não achadas na literatura encontram-se na subseção 4.4.2. No final do capítulo sugerimos uma possível aplicação da mecânica estatística não extensiva a um sistema de n rotores clássicos bidimensionais localizados em uma rede unidimensional.

4.1 A entropia S_q

Seja μ uma distribuição em \mathbb{R}^d com densidade f . A entropia S_q de μ está definida por¹ [7, 8]

$$S_q(\mu) = k \int_{\mathbb{R}^d} f(x) \ln_q \frac{1}{f(x)} dx, \quad q \in \mathbb{R}, \quad (4.1)$$

desde que a integral exista em $[-\infty, \infty]$, onde $k > 0$ é uma constante escolhida convenientemente. No caso de sistemas físicos põe-se $k = k_B \approx 1,38 \times 10^{-23} J/K$ (*constante de Boltzmann*). Vemos imediatamente de (4.1) que a entropia S_q é uma generalização da entropia de Boltzmann-Gibbs (S_1). Resulta que se $q \neq 1$, a entropia S_q está bem definida por (4.1) para toda distribuição absolutamente contínua em \mathbb{R}^d .²

A função q -logaritmo tem a seguinte propriedade importante:

$$\ln_q(ab) = \ln_q a + \ln_q b + (1 - q) \ln_q a \ln_q b, \quad q \in \mathbb{R}, a, b > 0. \quad (4.2)$$

Com efeito, por um lado temos que

$$\ln_q(ab) = \int_1^{ab} \frac{dx}{x^q} = \int_1^a \frac{dx}{x^q} + \int_a^{ab} \frac{dx}{x^q} = \ln_q a + a^{1-q} \ln_q b \quad (4.3)$$

¹Aqui usamos a convenção $0 \ln_q(1/0) = 0$.

²É possível que o mesmo seja verdade para a entropia S_1 ; porém, não temos prova disto. Por outro lado, até o momento não achamos uma distribuição para a qual a entropia S_1 não esteja definida.

e por outro lado, de (1.1), temos que $a^{1-q} = (1-q) \ln_q a + 1$. A relação (4.2) nos permite provar o seguinte:³ *Sejam μ e ν distribuições em \mathbb{R}^d e \mathbb{R}^p com densidades f e g respectivamente. Se $S_q(\mu)$ e $S_q(\nu)$ são finitos, então⁴*

$$S_q(\mu \times \nu) = S_q(\mu) + S_q(\nu) + \frac{1-q}{k} S_q(\mu) S_q(\nu). \quad (4.4)$$

Uma entropia S diz-se *aditiva* quando, dadas duas distribuições μ e ν tais que $S(\mu)$ e $S(\nu)$ são finitos, tem-se que

$$S(\mu \times \nu) = S(\mu) + S(\nu). \quad (4.5)$$

A relação (4.4) nos diz que a entropia S_q é não aditiva quando $q \neq 1$. Resulta que esta é a única propriedade conhecida até agora que diferencia a entropia S_q com $q \neq 1$ da entropia de Boltzmann-Gibbs [8]. Por exemplo, veremos agora que a entropia S_q é côncava para todo $q \in (0, 1) \cup (1, \infty)$.

Dadas as distribuições μ e ν em \mathbb{R}^d , tem-se que, para todo $t \in (0, 1)$, $t\mu + (1-t)\nu$ também é uma distribuição em \mathbb{R}^d . Além disso, se μ e ν têm densidades f e g respectivamente e $\mu \neq \nu$,⁵ então

$$S_q(t\mu + (1-t)\nu) = k \int_{\mathbb{R}^d} h_q(tf(x) + (1-t)g(x)) dx, \quad (4.6)$$

onde $h_q(y) = y \ln_q(1/y)$. Se $q > 0$, temos que $h_q''(y) = -qy^{q-2} < 0$ para todo $y > 0$. Logo, a função h_q é estritamente côncava no intervalo $(0, \infty)$. Por outro lado, como $\ln_q z$ é uma função monótona crescente de $z > 0$, temos que $ty \ln_q(1/y) < ty \ln_q(1/(ty))$ para todo $t \in (0, 1)$ e todo $y > 0$. Desta maneira, temos que a função h_q é estritamente côncava no intervalo $[0, \infty)$. Logo, se $q > 0$, temos que

$$h_q(tf(x) + (1-t)g(x)) > th_q(f(x)) + (1-t)h_q(g(x)), \quad 0 < t < 1, \quad (4.7)$$

para quase todo x . Portanto, se $q \neq 1$, $S_q(t\mu + (1-t)\nu) \geq tS_q(\mu) + (1-t)S_q(\nu)$.⁶ Assim, temos provado o seguinte: *Dado $q \in (0, 1) \cup (1, \infty)$, a entropia S_q é uma função côncava. Além disso, se μ e ν são distribuições diferentes tais que $S_q(\mu)$ e $S_q(\nu)$ são finitos, então, para todo $q > 0$,*

$$S_q(t\mu + (1-t)\nu) > tS_q(\mu) + (1-t)S_q(\nu), \quad 0 < t < 1. \quad (4.8)$$

Analogamente pode-se provar que a entropia S_q é uma função convexa se $q < 0$.

Vejamos um exemplo onde a entropia S_q não é estritamente côncava. Sejam μ e ν distribuições em \mathbb{R} com densidades

$$f(x) = \begin{cases} 1/2 & \text{se } x \in (-1, 1) \\ 0 & \text{se } x \notin (-1, 1) \end{cases} \quad (4.9)$$

³A prova desta afirmação encontra-se no final da seção.

⁴A densidade da distribuição produto $\mu \times \nu$ é a função $fg : \mathbb{R}^{d+p} \rightarrow [0, \infty)$.

⁵A condição $\mu \neq \nu$ implica que $f(x) \neq g(x)$ para quase todo $x \in \mathbb{R}$.

⁶Aqui usamos a monotonicidade da integral [71] e o fato de que, se $q \neq 1$, a entropia S_q está bem definida para toda distribuição absolutamente contínua em \mathbb{R}^d .

e

$$g(x) = \begin{cases} \frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}} & \text{se } x \in (-1, 1) \\ 0 & \text{se } x \notin (-1, 1). \end{cases} \quad (4.10)$$

Logo, temos que $S_2(\mu) = 1/2$ e

$$S_2(\nu) = k \int_{-1}^1 \frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}} \left(1 - \frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}}\right) dx = -\infty, \quad (4.11)$$

pois

$$\begin{aligned} \int_{\sqrt{1-1/\pi^2}}^1 \frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}} \left(\frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}} - 1\right) dx &= \int_{\sqrt{1-1/\pi^2}}^1 \frac{1}{\pi^2(1-x^2)} dx - 1 \\ &\geq \int_{\sqrt{1-1/\pi^2}}^1 \frac{x}{\pi^2(1-x^2)} dx - 1 \\ &= \infty. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Analogamente pode-se mostrar que $S_2(\frac{1}{2}\mu + \frac{1}{2}\nu) = -\infty$. Desta maneira temos que $S_2(\frac{1}{2}\mu + \frac{1}{2}\nu) = \frac{1}{2}S_2(\mu) + \frac{1}{2}S_2(\nu)$.

Seja um sistema de n componentes, onde cada componente pode se encontrar em um certo número de estados, caracterizados por certos parâmetros reais. Identifica-se um *microestado* do sistema por uma lista que contém os valores dos parâmetros associados a cada um dos seus componentes. Fazendo esta identificação, podemos descrever probabilisticamente o sistema considerando um espaço amostral contido em algum \mathbb{R}^d . Por exemplo, podemos ter um sistema físico clássico de n partículas, onde o estado de cada partícula está caracterizado pelos seus vetores posição e momentum (6 números reais). Logo, o espaço amostral neste caso vai ser o espaço de fases do sistema, o qual está contido em \mathbb{R}^{6n} .

Pela observação do parágrafo anterior, a todo sistema de n componentes podemos associar uma distribuição μ_n no conjunto dos seus microestados ($\subset \mathbb{R}^d$). Neste contexto, diz-se que uma entropia S é *extensiva* em relação a μ_n se

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{S(\mu_n)}{n} = L \neq 0, \pm\infty. \quad (4.13)$$

Vejam os seguintes exemplos:

- a) Seja um sistema de n componentes independentes tal que cada componente pode se encontrar em um número infinito de estados, os quais estão caracterizados por um parâmetro $p \in [0, l]$, onde $l \in (0, 1) \cup (1, \infty)$. Neste caso temos uma distribuição μ_n em \mathbb{R}^n com densidade

$$f_n(x) = \begin{cases} 1/l^n & \text{se } x \in [0, l]^n \\ 0 & \text{se } x \notin [0, l]^n. \end{cases} \quad (4.14)$$

Logo, a entropia S_1 em relação a μ_n é extensiva pois $S_1(\mu_n)/n = \log l$.

- b) Consideremos o sistema do exemplo anterior mas suponhamos que os componentes não sejam independentes. Mais ainda, suponhamos que as correlações entre os componentes seja de tal forma que tenhamos

$$f_n(x) = \begin{cases} \frac{1}{ln^l} & \text{se } x \in R_n \\ 0 & \text{se } x \notin R_n, \end{cases} \quad (4.15)$$

onde $R_n \subset \mathbb{R}^n$ tem volume ln^l . Logo, a entropia S_1 em relação a μ_n é não extensiva pois

$$\frac{S_1(\mu_n)}{n} = k \frac{l \log n + \log l}{n} \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty. \quad (4.16)$$

No entanto, a entropia S_q com $q = 1 - 1/l$ é extensiva em relação a μ_n pois

$$\begin{aligned} \frac{S_{1-1/l}(f)}{n} &= \frac{k}{n} \ln_{1-1/l}(ln^l) \\ &= \frac{kl}{n} (l^{1/l}n - 1) \rightarrow kl^{1+1/l}, \quad n \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Vale comentarmos que, segundo um resultado recente devido a Bergeron *et al* [74], o fato de uma determinada entropia ser extensiva em relação a uma distribuição não implica que ela é a única entropia com esta propriedade.

Digressão sobre a definição da entropia S_q . Vamos mostrar que, dado $q \neq 1$, a entropia S_q está bem definida por (4.1) para toda distribuição absolutamente contínua em \mathbb{R}^d . Para isto, só basta provarmos o seguinte fato: *Seja μ uma distribuição em \mathbb{R}^d com densidade f . Logo,*

- a) *se $q > 1$, então*

$$\int_{\mathbb{R}^d} \left(f(x) \ln_q \frac{1}{f(x)} \right)^+ dx \leq \frac{1}{q-1}, \quad (4.18)$$

onde $g^+(x) := \max\{g(x), 0\}$;

- b) *se $q < 1$, então*

$$\int_{\mathbb{R}^d} \left(f(x) \ln_q \frac{1}{f(x)} \right)^- dx \leq \frac{1}{1-q}, \quad (4.19)$$

onde $g^-(x) := \max\{-g(x), 0\}$.

Com efeito, por definição tem-se que

$$S_q(\mu) = k \int_{\mathbb{R}^d} \left(f(x) \ln_q \frac{1}{f(x)} \right)^+ dx - k \int_{\mathbb{R}^d} \left(f(x) \ln_q \frac{1}{f(x)} \right)^- dx. \quad (4.20)$$

Desta maneira, se uma das integrais é finita, $S_q(\mu)$ existe em $[-\infty, \infty]$.⁷

Vamos provar o item a. Se $y \geq 0$, temos que

$$\left(y \ln_q \frac{1}{y}\right)^+ = y \left(\ln_q \frac{1}{y}\right)^+, \quad q \in \mathbb{R}. \quad (4.21)$$

Se $q > 1$, temos que

$$y \left(\ln_q \frac{1}{y}\right)^+ = \begin{cases} 0 & \text{se } y \geq 1 \\ y \ln_q \frac{1}{y} & \text{se } 0 \leq y \leq 1. \end{cases} \quad (4.22)$$

Logo,

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} \left(f(x) \ln_q \frac{1}{f(x)}\right)^+ dx &= \int_{[0 \leq f \leq 1]} f(x) \ln_q \frac{1}{f(x)} dx \\ &= \int_{[0 \leq f \leq 1]} \frac{f(x) - (f(x))^q}{q-1} dx \\ &\leq \frac{1}{q-1} \int_{[0 \leq f \leq 1]} f(x) dx \\ &\leq \frac{1}{q-1}. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Analogamente temos que, se $q < 1$,

$$y \left(\ln_q \frac{1}{y}\right)^- = \begin{cases} -y \ln_q \frac{1}{y} & \text{se } y \geq 1 \\ 0 & \text{se } 0 \leq y \leq 1. \end{cases} \quad (4.24)$$

⁷O esboço da prova de que a entropia S_1 é finita para a maioria das distribuições absolutamente contínuas que aparecem na prática é o seguinte: Primeiro notamos que $(y \ln(1/y))^+ = -y \ln y$ se $0 \leq y \leq 1$; caso contrário $(y \ln(1/y))^+ = 0$. Analogamente, tem-se que $(y \ln(1/y))^- = y \ln y$ se $y \geq 1$; caso contrário $(y \ln(1/y))^- = 0$. Logo, para cada inteiro positivo n , tem-se que

$$\int_{\mathbb{R}^d} \left(f(x) \ln \frac{1}{f(x)}\right)^+ dx = \int_{[0 \leq f \leq 1]} f(x) \ln \frac{1}{f(x)} dx \leq \int_{[0 \leq f \leq 1]} n(f(x))^{1-1/n} dx$$

e

$$\int_{\mathbb{R}^d} \left(f(x) \ln \frac{1}{f(x)}\right)^- dx = \int_{[f \geq 1]} f(x) \ln f(x) dx \leq \int_{[f \geq 1]} n(f(x))^{1+1/n} dx.$$

Para as densidades mais comuns, existe n suficientemente grande tal que as integrais nos extremos direitos de ambas desigualdades são finitas.

Logo,

$$\begin{aligned}
 \int_{\mathbb{R}^d} \left(f(x) \ln_q \frac{1}{f(x)} \right)^- dx &= \int_{[f \geq 1]} -f(x) \ln_q \frac{1}{f(x)} dx \\
 &= \int_{[f \geq 1]} \frac{f(x) - (f(x))^q}{1 - q} dx \\
 &\leq \frac{1}{1 - q} \int_{[f \geq 1]} f(x) dx \\
 &\leq \frac{1}{1 - q}
 \end{aligned} \tag{4.25}$$

e o item b fica provado.

Demonstração de (4.4). A prova de (4.4) está baseada no seguinte resultado importante sobre integração [71]:

Teorema de Fubini. *Seja $h : \mathbb{R}^{d+p} \rightarrow \mathbb{R}$ uma função (mensurável). Se $h \geq 0$ ou $\int_{\mathbb{R}^{d+p}} |h(z)| dz < \infty$, então*

$$\int_{\mathbb{R}^{d+p}} h(z) dz = \int_{\mathbb{R}^d} dx \int_{\mathbb{R}^p} h(x, y) dy = \int_{\mathbb{R}^p} dy \int_{\mathbb{R}^d} h(x, y) dx.$$

Vejamos então a prova de (4.4). Como $S_q(\mu)$ e $S_q(\nu)$ são finitos, tem-se que $\int_{\mathbb{R}^d} f(x) \left| \ln_q \frac{1}{f(x)} \right| dx < \infty$ e $\int_{\mathbb{R}^p} g(y) \left| \ln_q \frac{1}{g(y)} \right| dy < \infty$. Utilizando o teorema de Fubini e (4.2), temos que

$$\begin{aligned}
 \int_{\mathbb{R}^{d+p}} f(x)g(y) \left| \ln_q \frac{1}{f(x)g(y)} \right| dx dy &\leq \\
 &\int_{\mathbb{R}^d} f(x) \left| \ln_q \frac{1}{f(x)} \right| dx + \int_{\mathbb{R}^p} g(y) \left| \ln_q \frac{1}{g(y)} \right| dy \\
 &\quad + |1 - q| \int_{\mathbb{R}^d} f(x) \left| \ln_q \frac{1}{f(x)} \right| dx \int_{\mathbb{R}^p} g(y) \left| \ln_q \frac{1}{g(y)} \right| dy, \tag{4.26}
 \end{aligned}$$

onde o lado direito da desigualdade é finito. Logo, novamente pelo teorema de Fubini, temos que

$$\begin{aligned}
 S_q(\mu \times \nu) &= k \int_{\mathbb{R}^{d+p}} f(x)g(y) \ln_q \frac{1}{f(x)g(y)} dx dy \\
 &= k \int_{\mathbb{R}^d} f(x) \ln_q \frac{1}{f(x)} dx + k_B \int_{\mathbb{R}^p} g(y) \ln_q \frac{1}{g(y)} dy \\
 &\quad + (1 - q)k \int_{\mathbb{R}^d} f(x) \ln_q \frac{1}{f(x)} dx \int_{\mathbb{R}^p} g(y) \ln_q \frac{1}{g(y)} dy \\
 &= S_q(\mu) + S_q(\nu) + \frac{1 - q}{k} S_q(\mu) S_q(\nu),
 \end{aligned} \tag{4.27}$$

que é o que queríamos provar.

4.2 Extremização da entropia

Seja um sistema físico clássico no equilíbrio termodinâmico do qual tenhamos muito pouca informação (macroscópica). Devido a isto, é possível definirmos infinitas distribuições no espaço de fases do sistema. A questão que surge agora é em que nos baseamos para escolher uma distribuição no lugar de outra? Em 1957, E.T. Jaynes [69] estabeleceu o *princípio da máxima entropia*, o qual diz basicamente o seguinte: *A distribuição ρ que devemos considerar no espaço de fases do sistema deve ser compatível com a informação que temos do sistema e deve maximizar a entropia S_1 quando ela é restrita a distribuições que têm esta propriedade.*

A distribuição ρ tem a propriedade de que a probabilidade de qualquer microestado que seja compatível com a informação que temos do sistema é positiva. Em outras palavras, ρ é a pior distribuição que podemos considerar, baseados na pouca informação que temos do sistema. Interessantemente, quando o número de componentes do sistema é muito grande, como acontece na realidade, o uso de ρ faz que as grandezas macroscópicas relacionadas ao sistema possuam distribuições concentradas (largura desprezível).

Quando a termodinâmica estava se desenvolvendo, os sistemas físicos que se consideravam em aquela época envolviam forças de curto alcance ou correlações fracas entre seus componentes microscópicos. Pode-se dever a isto que a hipótese de que todo sistema atinge o equilíbrio termodinâmico tenha sido satisfatória. Além disso, os valores esperados calculados utilizando a distribuição ρ são efetivamente iguais aos valores das grandezas macroscópicas obtidos experimentalmente. Deve-se a isto o grande sucesso da teoria de Boltzmann-Gibbs.

Recentemente tem-se despertado o interesse pelo estudo de sistemas que apresentam interações de longo alcance ou correlações fortes entre seus componentes [10, 11, 12, 13]. Alguns destes sistemas apresentam estados metaestáveis, os quais, segundo alguns resultados computacionais, têm uma duração que cresce com o número de componentes do sistema [11]. Devido a isto, as propriedades desta classe de sistemas no equilíbrio termodinâmico podem ser menos interessantes em relação às suas propriedades em um estado metaestável. Por outro lado, a mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs pode não ser aplicável a esta classe de sistemas, já seja pelo fato da função de partição não estar definida ou pelo fato da entropia S_1 não ser extensiva em relação à distribuição que a maximiza. Uma tentativa de estudar estes sistemas é estendermos o princípio da máxima entropia para ser utilizado com a entropia S_q da seguinte maneira:⁸ *A distribuição ρ_q que devemos considerar no espaço de fases de um sistema que apresenta interações de longo alcance ou correlações fortes entre seus componentes deve ser compatível com a informação disponível do sistema e deve extremizar a entropia S_q quando ela é restrita a distribuições que têm esta propriedade. O valor do parâmetro $q \neq 0$ deve ser tal que a entropia S_q seja extensiva em relação a ρ_q .*

Vejam os exemplos. Seja um sistema clássico de n partículas com hamiltoniano

⁸Esta extensão do princípio da máxima entropia deve ser vista como uma conjectura.

H . Suponhamos que saibamos que o valor esperado de H é U . Vamos encontrar de maneira puramente formal a densidade da distribuição ρ_q no espaço de fases que extremiza a entropia S_q nestas condições. Para isto consideramos o funcional

$$\Phi(f) = k_B \int_{\mathbb{R}^{6n}} f(x) \ln_q \frac{1}{f(x)} dx - \alpha k_B \left(\int_{\mathbb{R}^{6n}} f(x) dx - 1 \right) - \beta k_B \left(\int_{\mathbb{R}^{6n}} H(x) f(x) dx - U \right), \quad (4.28)$$

onde α e β são parâmetros de Lagrange. Efetuando a derivada variacional [75], temos que

$$\frac{\delta \Phi}{\delta f}(x) = k_B \left(\ln_q \frac{1}{f(x)} - (f(x))^{q-1} \right) - \alpha k_B - \beta k_B H(x). \quad (4.29)$$

A densidade de ρ_q é solução da equação $(\delta \Phi / \delta f)(x) = 0$, que, assumindo $q \neq 1$, está dada por

$$f_q(x) = \left(\frac{1}{q} [1 + (1 - q)(\alpha + \beta H(x))] \right)^{1/(q-1)}. \quad (4.30)$$

No entanto, vemos que em geral não é possível determinarmos α a partir da condição

$$\int_{\mathbb{R}^{6n}} \left(\frac{1}{q} [1 + (1 - q)(\alpha + \beta H(x))] \right)^{1/(q-1)} dx = 1. \quad (4.31)$$

A origem deste problema é termos considerado que conhecemos o valor esperado de H em relação a ρ . Na próxima seção daremos uma solução a este problema.

4.3 Generalização do conceito de energia interna

Suponhamos que U seja o valor da energia interna de um sistema físico clássico de n partículas que se encontra em equilíbrio termodinâmico com um reservatório térmico. Em outras palavras, sabemos que $\mathbf{E}H = U$, onde H é o hamiltoniano do sistema. Aqui, o valor esperado de H é a respeito da distribuição ρ obtida (formalmente) pela aplicação do princípio da máxima entropia. Pode-se obter que a densidade de ρ é $e^{-\beta H(x)} / Z$, onde β é o parâmetro de Lagrange associado ao vínculo do conhecimento da energia interna e $Z = \int_{\mathbb{R}^{6n}} e^{-\beta H(x)} dx$ é a *função de partição* do sistema.

Consideremos agora um sistema físico que apresenta interações de longo alcance ou correlações fortes entre seus componentes. Se H é o hamiltoniano do sistema, então é absolutamente razoável manter a definição de energia interna do sistema como um valor esperado de H . A sutileza está na escolha da distribuição a respeito da qual este valor esperado deve ser calculado. Experimentos e simulações computacionais parecem mostrar que sistemas fortemente correlacionados dão lugar a distribuições de calda longa (decaimento tipo lei de potência) [11, 12, 13]. Estas distribuições podem ter momentos infinitos ou não definidos (um exemplo é a distribuição de

Cauchy padrão). Desta maneira, definirmos a energia interna do sistema como o valor esperado do seu hamiltoniano em relação à distribuição que extremiza a entropia S_q pode não fazer sentido. Além disto, na seção anterior vimos que com este vínculo não é possível definirmos uma função de partição análogo ao caso de Boltzmann-Gibbs.

Na seção 1.2, definimos o conceito de distribuição escolta no contexto de variáveis aleatórias discretas. Vamos definir agora este conceito no contexto de distribuições absolutamente contínuas em \mathbb{R}^d . Dada uma distribuição μ em \mathbb{R}^d com densidade f , define-se sua *distribuição escolta* de ordem q como a distribuição $\mu^{(q)}$ em \mathbb{R}^d com densidade

$$f^{(q)}(x) = \frac{(f(x))^q}{\int_{\mathbb{R}^d} (f(y))^q dy}. \quad (4.32)$$

O símbolo $\mathbf{E}^{(q)}$ denotará valor esperado utilizando a distribuição $\mu^{(q)}$.

Vejamos um exemplo. A *distribuição de Cauchy padrão* tem densidade

$$f(x) = \frac{1}{\pi(1+x^2)}, \quad x \in \mathbb{R}. \quad (4.33)$$

Considerando esta distribuição, o valor esperado da variável aleatória $X(x) = x$ não está definido, pois

$$\int_{-\infty}^{-1} -\frac{x}{\pi(1+x^2)} dx = \int_1^{\infty} \frac{x}{\pi(1+x^2)} dx \geq \int_1^{\infty} \frac{x}{2x^2} dx = \infty. \quad (4.34)$$

No entanto, se consideramos a distribuição escolta de ordem 2 da distribuição de Cauchy padrão, cuja densidade é

$$f^{(2)}(x) dx = \frac{2}{\pi(1+x^2)^2} dx, \quad (4.35)$$

vamos ter que

$$\mathbf{E}^{(2)} X = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2x}{\pi(1+x^2)^2} dx = 0. \quad (4.36)$$

O exemplo anterior ilustra que podemos encontrar valores de q tais que tenhamos valores esperados finitos utilizando a distribuição escolta de ordem q de uma dada distribuição. Isto sugere que, no caso de um sistema físico clássico que apresenta interações de longo alcance ou correlações fortes entre seus componentes, a *energia interna* deve ser definida como o valor esperado do hamiltoniano do sistema a respeito da distribuição escolta de ordem q da distribuição que extremiza a entropia S_q [46]. Levando em conta isto vamos encontrar de maneira puramente formal a distribuição ρ_q que extremiza a entropia S_q sabendo que a energia interna do sistema é U_q . Para isto, suponhamos que o sistema esteja composto de n partículas e que seu hamiltoniano seja H . A densidade da distribuição ρ_q , f_q , deve extremizar o

funcional

$$\begin{aligned} \Phi(f) = k_B \int_{\mathbb{R}^{6n}} f(x) \ln_q \frac{1}{f(x)} dx - \alpha k_B \left(\int_{\mathbb{R}^{6n}} f(x) dx - 1 \right) \\ - \beta k_B \left(\int_{\mathbb{R}^{6n}} H(x) f^{(q)}(x) dx - U_q \right), \quad (4.37) \end{aligned}$$

onde α e β são parâmetros de Lagrange. A única parte nova de (4.37) em relação a (4.28) é o terceiro termo da direita. Focando neste termo, temos que

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta f} \left(\int_{\mathbb{R}^{6n}} H(y) f^{(q)}(y) dy \right) (x) &= \frac{qH(x)[f(x)]^{q-1}}{\int_{\mathbb{R}^{6n}} [f(y)]^q dy} \\ &\quad - \frac{q[f(x)]^{q-1}}{\left\{ \int_{\mathbb{R}^{6n}} [f(y)]^q dy \right\}^2} \int_{\mathbb{R}^{6n}} H(y) (f(y))^q dy \quad (4.38) \\ &= \frac{q[f(x)]^{q-1} [H(x) - U_q]}{\int_{\mathbb{R}^{6n}} (f(y))^q dy}. \end{aligned}$$

Por conseguinte, a equação $(\delta\Phi/\delta f)|_{f=f_q} = 0$ se lê

$$\ln_q \frac{1}{f_q(x)} - [f_q(x)]^{q-1} - \alpha - q\bar{\beta}_q [f_q(x)]^{q-1} [H(x) - U_q] = 0, \quad (4.39)$$

onde

$$\bar{\beta}_q = \frac{\beta}{\int_{\mathbb{R}^{6n}} [f_q(x)]^q dx}. \quad (4.40)$$

Assumindo que $q \neq 1$, tem-se de (4.39) que

$$\rho_q(x) = \left[\frac{1 + \alpha(1 - q)}{q} \right]^{1/(q-1)} \frac{1}{[1 - (1 - q)\bar{\beta}_q [H(x) - U_q]]^{1/(q-1)}}. \quad (4.41)$$

Utilizando a condição de normalização podemos eliminar o parâmetro α e obter que⁹

$$\rho_q(x) = \frac{1}{\bar{Z}_q} e_q^{-\bar{\beta}_q [H(x) - U_q]}, \quad (4.42)$$

onde

$$\bar{Z}_q := \int_{\mathbb{R}^{6n}} e_q^{-\bar{\beta}_q [H(x) - U_q]} dx \quad (4.43)$$

é chamada de *função de partição* \bar{Z}_q do sistema.

⁹Segue imediatamente de (4.2) que $e_q^{x+y} \neq e_q^x e_q^y$ quando $q \neq 1$.

4.4 O ensemble canônico da mecânica estatística não extensiva

Nesta seção vamos considerar um sistema clássico de n partículas que apresenta interações de longo alcance ou correlações fortes entre as partículas. Além disso, o hamiltoniano do sistema será denotado por H e vamos supor que conhecemos que energia interna do sistema é U_q . Nestas condições, pelo que foi visto no final da seção anterior, temos que a distribuição que devemos usar no espaço de fases, ρ_q , tem densidade

$$f_q(x) = \frac{1}{\bar{Z}_q} e_q^{-\bar{\beta}_q[H(x)-U_q]}, \quad (4.44)$$

onde $\bar{\beta}_q$ e \bar{Z}_q foram definidas em (4.40) e (4.43) respectivamente. Esta distribuição caracteriza o chamado *ensemble canônico da mecânica estatística não extensiva*.

No contexto do ensemble canônico da mecânica estatística não extensiva, a *entropia do sistema* é $S_q(\rho_q)$, a qual vamos denotar simplesmente por S_q . Para achar uma relação entre S_q e \bar{Z}_q , precisamos da seguinte propriedade da função q -logaritmo:

$$\ln_q \frac{a}{b} = \ln_q a - \left(\frac{a}{b}\right)^{1-q} \ln_q b, \quad a, b > 0. \quad (4.45)$$

Para provar isto, notamos que

$$\ln_q \frac{a}{b} = \int_1^a \frac{dt}{t^q} + \int_a^{a/b} \frac{dt}{t^q} = \ln_q a + \left(\frac{b}{a}\right)^{q-1} \int_b^1 \frac{1}{t^q} dt, \quad (4.46)$$

onde o lado direito desta equação é igual ao lado direito de (4.45). Ora, utilizando (4.45) na definição da entropia do sistema, temos que

$$\begin{aligned} S_q &= k_B \int_{\mathbb{R}^{6n}} f_q(x) \ln_q \frac{\bar{Z}_q}{e_q^{-\bar{\beta}_q[H(x)-U_q]}} dx \\ &= k_B \ln_q \bar{Z}_q \int_{\mathbb{R}^{6n}} f_q(x) dx + k_B \bar{\beta}_q \int_{\mathbb{R}^{6n}} [f_q(x)]^q [H(x) - U_q] dx. \end{aligned} \quad (4.47)$$

Como a última integral é nula, obtemos que

$$S_q = k_B \ln_q \bar{Z}_q. \quad (4.48)$$

A relação (4.48) pode ser utilizada como ponto de partida para encontrar relações termodinâmicas. Por exemplo, derivando (4.48) a respeito de U_q , temos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_q}{\partial U_q} &= \frac{k_B}{\bar{Z}_q^q} \int_{\mathbb{R}^{6n}} \left(e_q^{-\bar{\beta}_q[H(x)-U_q]} \right)^q \left(\bar{\beta}_q - \frac{\partial \bar{\beta}_q}{\partial U_q} [H(x) - U_q] \right) dx \\ &= k_B \bar{\beta}_q - k_B \frac{\partial \bar{\beta}_q}{\partial U_q} \int_{\mathbb{R}^{6n}} \frac{1}{\bar{Z}_q^q} \left(e_q^{-\bar{\beta}_q[H(x)-U_q]} \right)^q [H(x) - U_q] dx. \end{aligned} \quad (4.49)$$

Como a última integral é nula, obtemos que

$$\frac{\partial S_q}{\partial U_q} = k_B \beta. \quad (4.50)$$

Introduzindo o parâmetro $T = 1/(k_B \beta)$, definimos a *energia livre de Helmholtz* do sistema por

$$F_q = U_q - T S_q. \quad (4.51)$$

Temos que

$$\frac{\partial F_q}{\partial T} = \frac{\partial U_q}{\partial T} - S_q - T \frac{\partial S_q}{\partial T} = -S_q + \frac{\partial U_q}{\partial T} - T \frac{\partial S_q}{\partial U_q} \frac{\partial U_q}{\partial T}. \quad (4.52)$$

Utilizando (4.50), obtemos que

$$S_q = -\frac{\partial F_q}{\partial T}. \quad (4.53)$$

Também temos que

$$\frac{\partial(\beta F_q)}{\partial \beta} = F_q + \beta \frac{\partial F_q}{\partial \beta} = F_q - \frac{1}{k_B \beta} \frac{\partial F_q}{\partial T}, \quad (4.54)$$

de onde, em virtude de (4.53), obtemos que

$$U_q = \frac{\partial(\beta F_q)}{\partial \beta}. \quad (4.55)$$

Definimos o *calor específico* do sistema por

$$C_q = T \frac{\partial S_q}{\partial T}. \quad (4.56)$$

Utilizando (4.50) e (4.53), obtemos imediatamente que

$$C_q = \frac{\partial U_q}{\partial T} = -T \frac{\partial^2 F_q}{\partial T^2}. \quad (4.57)$$

4.4.1 Relações para a energia interna

As relações termodinâmicas que temos mostrado ilustram que todas as grandezas termodinâmicas podem ser derivadas a partir da função de partição \bar{Z}_q . No entanto, calcular a função de partição \bar{Z}_q apresenta uma dificuldade técnica que é o fato de ela depender de U_q e U_q depender de \bar{Z}_q simultaneamente. Para passar por cima disto, vamos definir uma nova função de partição que não vai depender explicitamente de U_q .

Assumindo que $1 + (1 - q)\bar{\beta}_q U_q > 0$, temos que

$$\begin{aligned} e_q^{-\bar{\beta}_q[H(x)-U_q]} &= [1 + (1 - q)\bar{\beta}_q U_q - (1 - q)\bar{\beta}_q H(x)]^{1/(1-q)} \\ &= [1 + (1 - q)\bar{\beta}_q U_q]^{1/(1-q)} \left(1 - \frac{(1 - q)\bar{\beta}_q H(x)}{1 + (1 - q)\bar{\beta}_q U_q} \right)^{1/(1-q)} \\ &= e_q^{\bar{\beta}_q U_q} e_q^{-\beta_q H(x)}, \end{aligned} \quad (4.58)$$

onde

$$\beta_q = \frac{\bar{\beta}_q}{1 + (1 - q)\bar{\beta}_q U_q}. \quad (4.59)$$

Logo, temos que

$$\bar{Z}_q = e_q^{\bar{\beta}_q U_q} Z_q, \quad (4.60)$$

onde

$$Z_q := \int_{\mathbb{R}^{6n}} e_q^{-\beta_q H(x)} dx \quad (4.61)$$

é chamada de *função de partição* Z_q . Desta maneira temos que

$$f_q(x) = \frac{1}{\bar{Z}_q} e_q^{-\bar{\beta}_q[H(x)-U_q]} = \frac{1}{Z_q} e_q^{-\beta_q H(x)}. \quad (4.62)$$

Vamos ver agora duas relações para obter a energia interna diretamente a partir da função de partição Z_q . Primeiramente, segue de (4.41) e da definição da entropia do sistema que

$$\begin{aligned} S_q &= k_B \int_{\mathbb{R}^{6n}} f_q(x) \ln_q \frac{1}{f_q(x)} dx \\ &= \frac{k_B}{1 - q} \int_{\mathbb{R}^{6n}} \{[f_q(x)]^q - f_q(x)\} dx \\ &= \frac{k_B}{1 - q} \left[\frac{1}{\bar{Z}_q^q} \int_{\mathbb{R}^{6n}} \left(e_q^{-\bar{\beta}_q[H(x)-U_q]} \right)^q dx - 1 \right]. \end{aligned} \quad (4.63)$$

Comparando isto com (4.48), obtemos que

$$\bar{Z}_q = \int_{\mathbb{R}^{6n}} e_q^{-\bar{\beta}_q[H(x)-U_q]} dx = \int_{\mathbb{R}^{6n}} \left(e_q^{-\bar{\beta}_q[H(x)-U_q]} \right)^q dx. \quad (4.64)$$

Em virtude disto e de (4.60) temos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial Z_q}{\partial \beta_q} &= - \int_{\mathbb{R}^{6n}} H(x) \left(e_q^{-\beta_q H(x)} \right)^q dx \\ &= -Z_q^q \int_{\mathbb{R}^{6n}} H(x) [f_q(x)]^q dx \\ &= -\bar{Z}_q^{1-q} Z_q^q \int_{\mathbb{R}^{6n}} H(x) f_q^{(q)}(x) dx \\ &= -Z_q U_q \left(e_q^{\bar{\beta}_q U_q} \right)^{1-q}. \end{aligned} \quad (4.65)$$

Segue de (4.59) que

$$\bar{\beta}_q = \frac{\beta_q}{1 - (1 - q)\beta_q U_q}. \quad (4.66)$$

Isto junto a (4.59) implicam que

$$e_q^{-\beta_q U_q} = \frac{1}{e_q^{\bar{\beta}_q U_q}}. \quad (4.67)$$

Logo, utilizando isto em (4.65), obtemos que

$$-\frac{\partial \ln Z_q}{\partial \beta_q} = \frac{U_q}{1 - (1 - q)\beta_q U_q}. \quad (4.68)$$

Rearrmando termos, obtemos nossa primeira relação para a energia interna:

$$U_q = -\frac{\frac{\partial \ln Z_q}{\partial \beta_q}}{1 - (1 - q)\beta_q \frac{\partial \ln Z_q}{\partial \beta_q}}. \quad (4.69)$$

Por outro lado, utilizando (4.60) em (4.64), temos que

$$\begin{aligned} Z_q &= \frac{1}{e_q^{\bar{\beta}_q U_q}} \int_{\mathbb{R}^{6n}} \left(e_q^{-\bar{\beta}_q [H(x) - U_q]} \right)^q dx \\ &= \left(e_q^{\bar{\beta}_q U_q} \right)^{q-1} \int_{\mathbb{R}^{6n}} \left(e_q^{-\beta_q H(x)} \right)^q dx \\ &= [1 - (1 - q)\beta_q U_q] \int_{\mathbb{R}^{6n}} \left(e_q^{-\beta_q H(x)} \right)^q dx, \end{aligned} \quad (4.70)$$

onde na última igualdade temos usado (4.67). Rearrmando termos, obtemos nossa segunda relação para energia interna:

$$U_q = \frac{1}{(1 - q)\beta_q} \left(1 - \frac{Z_q}{\int_{\mathbb{R}^{6n}} \left(e_q^{-\beta_q H(x)} \right)^q dx} \right), \quad q \neq 1. \quad (4.71)$$

Esta relação tem a peculiaridade de não apresentar o operador de derivação. Isto pode ser uma vantagem quando a função de partição Z_q só pode ser obtida numericamente por pontos mas não analiticamente.

É importante ressaltarmos que, se para um determinado sistema conseguimos obter uma equação calórica $U_q = U_q(\beta_q)$, poderemos encontrar sem dificuldade relações $\bar{\beta}_q = \bar{\beta}_q(\beta_q)$ e $\bar{Z}_q = \bar{Z}_q(\beta_q)$ por intermédio de (4.66) e (4.60). Além disso, utilizando (4.64) e (4.40), vamos obter também uma relação $\beta = \beta(\beta_q)$. Desta maneira, se dispomos de resultados computacionais ou experimentais, poderíamos identificar qual dos parâmetros ‘beta’ seria o mais indicado para ser uma temperatura do sistema.

4.4.2 Relação entre os ensembles canônicos da mecânica estatística não extensiva e da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs

Nesta seção vamos mostrar uma relação entre a função de partição Z_q da mecânica estatística não extensiva e a função de partição Z da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs. Para obtermos esta relação, precisamos da seguinte propriedade da q -exponencial: *Dado $q > 1$, temos que*

$$e_q^{-x} = \frac{1}{\Gamma(\frac{1}{q-1})} \int_0^\infty t^{(2-q)/(q-1)} e^{-[1+(q-1)x]t} dt, \quad x > 0. \quad (4.72)$$

A prova desta relação segue diretamente do seguinte fato:

$$\int_0^\infty t^{x-1} e^{-at} dt = \frac{1}{a^x} \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt = \frac{\Gamma(x)}{a^x}, \quad a, x > 0. \quad (4.73)$$

Se $q > 1$, utilizando (4.72) em (4.61), temos que

$$Z_q = \frac{1}{\Gamma(\frac{1}{q-1})} \int_{\mathbb{R}^{6n}} dx \int_0^\infty t^{(2-q)/(q-1)} e^{-[1+(q-1)\beta_q H(x)]t} dt. \quad (4.74)$$

Pelo teorema de Fubini temos que

$$Z_q = \frac{1}{\Gamma(\frac{1}{q-1})} \int_0^\infty t^{(2-q)/(q-1)} e^{-t} dt \int_{\mathbb{R}^{6n}} e^{-(q-1)\beta_q t H(x)} dx. \quad (4.75)$$

Desta maneira obtemos a seguinte relação entre as funções de partição Z_q e Z :

$$Z_q = \frac{1}{\Gamma(\frac{1}{q-1})} \int_0^\infty t^{(2-q)/(q-1)} e^{-t} Z((q-1)\beta_q t) dt. \quad (4.76)$$

Além disso, de forma análoga podemos obter que

$$\int_{\mathbb{R}^{6n}} (e_q^{-\beta_q H(x)})^q dx = \frac{1}{\Gamma(\frac{q}{q-1})} \int_0^\infty t^{1/(q-1)} e^{-t} Z((q-1)\beta_q t) dt. \quad (4.77)$$

Logo, utilizando (4.76) e (4.77) em (4.71), obtemos que

$$U_q = \frac{1}{(q-1)\beta_q} \left(\frac{\int_0^\infty t^{(2-q)/(q-1)} e^{-t} Z((q-1)\beta_q t) dt}{(q-1) \int_0^\infty t^{1/(q-1)} e^{-t} Z((q-1)\beta_q t) dt} - 1 \right). \quad (4.78)$$

Vejamos a aplicação das relações (4.76), (4.69) e (4.78) no caso de um gás ideal. Esta aplicação deve ser vista como um mero exercício matemático, pois um gás ideal está composto de partículas não interagentes e é satisfatoriamente descrita pela

teoria de Boltzmann-Gibbs. A função de partição de um gás ideal d -dimensional de n partículas clássicas que ocupa um volume V é

$$Z = \frac{V^n}{n!h^{nd}} \left(\frac{2m\pi}{\beta} \right)^{nd/2}, \quad (4.79)$$

onde $h \approx 6.63 \times 10^{-34} J \cdot s$ é a *constante de Planck*. Logo, considerando $q > 1$, segue de (4.76) que

$$Z_q = \frac{V^n}{n!h^{nd}} \left(\frac{2m\pi}{(q-1)\beta_q} \right)^{nd/2} \int_0^\infty t^{(2-q)/(q-1)-nd/2} e^{-t} dt. \quad (4.80)$$

A integral acima é convergente se, e somente se, $1 < q < 1 + 2/(nd)$.¹⁰ Nestas condições temos que

$$Z_q = \frac{V^n}{n!h^{nd}} \left(\frac{2m\pi}{(q-1)\beta_q} \right)^{nd/2} \Gamma\left(\frac{1}{q-1} - \frac{nd}{2}\right). \quad (4.81)$$

Utilizando (4.69), obtemos diretamente que

$$U_q = \frac{nd}{\beta_q[2 + (1-q)nd]}. \quad (4.82)$$

A equação (4.82) pode ser rescrita em termos de $\bar{\beta}_q$ por meio de (4.59). Neste caso temos que

$$U_q = \frac{nd}{2\bar{\beta}_q}. \quad (4.83)$$

Se utilizamos (4.78) no cálculo da energia interna, então temos que

$$\begin{aligned} U_q &= \frac{1}{(q-1)\beta_q} \left(\frac{\int_0^\infty t^{(2-q)/(q-1)-nd/2} e^{-t} dt}{(q-1) \int_0^\infty t^{1/(q-1)-nd/2} e^{-t} dt} - 1 \right) \\ &= \frac{1}{(q-1)\beta_q} \left(\frac{\Gamma\left(\frac{1}{q-1} - \frac{nd}{2}\right)}{(q-1)\Gamma\left(\frac{q}{q-1} - \frac{nd}{2}\right)} - 1 \right) = \frac{nd}{\beta_q[2 + (1-q)nd]}. \end{aligned} \quad (4.84)$$

Desta maneira temos verificado que (4.69) e (4.78) fornecem as mesmas expressões para a energia interna.

4.5 O modelo α -XY

O *modelo α -XY* é um sistema de n spins bidimensionais clássicos localizados em uma rede d -dimensional, onde o i -ésimo spin está caracterizado pelo ângulo θ_i mediante

¹⁰Como $1 < q < 1 + 2/(nd)$, podemos ver que quando n cresce, q aproxima-se de 1. Logo, no limite termodinâmico devemos ter $q = 1$, que é o esperado.

a relação $\vec{s}_i = (\cos \theta_i, \sin \theta_i)$. O hamiltoniano deste sistema é [47]

$$H(\vec{\theta}, \vec{L}) = \sum_{i=1}^n \frac{L_i^2}{2} + \frac{1}{\tilde{n}} \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{j=1 \\ j < i}}^n \frac{1 - \cos(\theta_i - \theta_j)}{r_{ij}^\alpha}. \quad (4.85)$$

onde \vec{L}_i é o momento angular do i -ésimo spin, r_{ij} é a distância entre os spins i e j , $\alpha \geq 0$ é um parâmetro real que controla o alcance da interação e [8]

$$\tilde{n} = \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{j=1 \\ j < i}}^n \frac{1}{r_{ij}^\alpha}. \quad (4.86)$$

O modelo α -XY apresenta interações de longo alcance quando $\alpha < d$. Além disso, simulações computacionais mostram que este sistema dá origem a distribuições de momentos angulares do tipo q -gaussiana (ver, por exemplo, [11]). Desta maneira, acreditamos que a mecânica estatística não extensiva deva descrever este sistema. No entanto, Campa et al. [49, 50] (ver também [48]) calcularam analiticamente a função de partição (Boltzmann-Gibbs) do modelo α -XY unidimensional e, entre outras coisas, mostraram que a equação calórica deste modelo não depende do valor do parâmetro α .

O fato aparentemente contraditório de que a mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs dá resultados finitos no modelo α -XY unidimensional, não implica que a mecânica estatística não extensiva não seja aplicável a este modelo. É possível que a mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs descreva o equilíbrio termodinâmico do modelo α -XY. Porém, acontece que este modelo apresenta estados metaestáveis cujas durações, segundo simulações computacionais [11], crescem com o número de rotores n . Desta maneira, no limite termodinâmico, o estado de equilíbrio será atingido pelo sistema em um tempo exageradamente longo. Por conseguinte, as propriedades termodinâmicas do sistema no estado de equilíbrio podem não ser de nosso interesse, mas sim pode nos interessar as propriedades do sistema em um estado metaestável. É aqui onde a mecânica estatística não extensiva pode jogar um papel relevante.

Conseguir descrever o modelo α -XY utilizando a mecânica estatística não extensiva seria o primeiro exemplo na literatura sobre a aplicação desta teoria a um modelo que apresenta interações de longo alcance. Porém, é uma tarefa complicada que ainda se encontra em andamento. Nesta seção só vamos mostrar um possível roteiro para completar esta tarefa.

Primeiramente vamos considerar o modelo α -XY no caso não trivial (há interações de longo alcance) mais simples. Isto é, vamos considerar que os spins estão localizados em uma rede unidimensional ($d = 1$) e que o alcance da interação é infinito ($\alpha = 0$). Nestas condições, $\tilde{n} = n - 1 \sim n$ (ver (4.86)) e o hamiltoniano do sistema pode ser escrito como

$$H(\vec{\theta}, \vec{L}) = \sum_{i=1}^n \frac{L_i^2}{2} + \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)]. \quad (4.87)$$

A partir daqui, seguindo a solução de Antoni e Ruffo [48], vamos ter que a função de partição do sistema está dada aproximadamente por¹¹

$$Z \approx \frac{n}{2\pi\beta} \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{n/2} e^{na(x_0) - \beta n/2} R(\beta, n), \quad (4.88)$$

onde

$$R(\beta, n) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[\frac{n}{2} a''(x_0) \left(\sqrt{y_1^2 + y_2^2} - x_0 \right)^2 \right] dy_1 dy_2, \quad (4.89)$$

e x_0 maximiza a função

$$a(x) = -\frac{x^2}{2\beta} + \ln(2\pi I_0(x)), \quad (4.90)$$

ou seja, x_0 satisfaz a relação

$$-\frac{x_0}{\beta} + \frac{I_1(x_0)}{I_0(x_0)} = 0. \quad (4.91)$$

Com o objetivo de aplicar o ensemble canônico da mecânica estatística não extensiva ao modelo 0-XY unidimensional, nós estamos interessados na expressão da função de partição que aparece em (4.88), pois depois poderemos obter a função de partição Z_q do sistema mediante (4.76). Devido a isto, precisamos conhecer a expressão de $R(\beta, n)$. Utilizando coordenadas polares em (4.89), temos que

$$R(\beta, n) = 2\pi \int_0^{\infty} r \exp \left(\frac{n}{2} a''(x_0) (r - x_0)^2 \right) dr. \quad (4.92)$$

Fazendo a mudança de variáveis $t = r - x_0$, temos que

$$\begin{aligned} R(\beta, N) &= 2\pi x_0 \int_{-x_0}^{\infty} \exp \left(\frac{n}{2} a''(x_0) t^2 \right) dt + 2\pi \int_{-x_0}^{\infty} t \exp \left(\frac{n}{2} a''(x_0) t^2 \right) dt. \\ &= \frac{\pi \sqrt{2\pi} x_0}{\sqrt{-na''(x_0)}} \left[1 + \operatorname{erf} \left(\left(\frac{-na''(x_0)}{2} \right)^{1/2} x_0 \right) \right] \\ &\quad - \frac{2\pi}{na''(x_0)} \exp \left(\frac{n}{2} a''(x_0) x_0^2 \right), \end{aligned} \quad (4.93)$$

onde

$$a''(x_0) = -\frac{1}{\beta} \left(1 + \frac{x_0^2}{\beta} \right) + \frac{1}{2} \left[1 + \frac{I_2(x_0)}{I_0(x_0)} \right]. \quad (4.94)$$

As equações (4.88), (4.90), (4.91), (4.93) e (4.94) nos dão toda a informação necessária para determinar numericamente a função de partição Z_q (mediante (4.76))

¹¹Antoni e Ruffo utilizaram o método do ponto de sela para aproximar função de partição [48].

e a energia interna (mediante (4.78)) do sistema quando este se encontrar em um estado metaestável. Nossa abordagem, baseada na relação entre as funções de partição, não nos permite continuar com os cálculos de forma analítica, devido a que a determinação da função de partição Z envolve a resolução de uma equação transcendental. Desta maneira, o seguinte passo é encontrarmos a função de partição Z_q e uma curva calórica (U_q vs. β_q) de forma numérica para diversos valores de $q > 1$. Acreditamos que deva existir um valor de q especial, o qual identificará o sistema.

Até agora só temos descrito um possível roteiro para aplicar a mecânica estatística não extensiva ao modelo α -XY unidimensional com $\alpha = 0$. No entanto, os mesmos passos podem ser utilizados no caso $\alpha > 0$, pois neste caso também dispomos da função de partição do sistema [49]. No cenário mais otimista, encontraríamos uma função $q = q(\alpha)$, a qual, esperamos, deve ser tal que $q(\alpha) = 1$ para todo $\alpha > 1$ e $q(\alpha) > 1$ para todo $\alpha \in [0, 1)$ [11] (ver também [12]).

Capítulo 5

Conclusões e comentários finais

Na primeira parte desta tese estudamos dois modelos probabilistas que envolvem variáveis aleatórias fortemente correlacionadas. O primeiro modelo consistiu em um arranjo triangular (ver seção 1.3)

$$\begin{array}{ccccccc} X_{q,1,1} & & & & & & \\ X_{q,2,1} & X_{q,2,2} & & & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & & & & \\ X_{q,n,1} & X_{q,n,2} & \cdots & X_{q,n,n} & & & \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots & & \end{array} \quad (5.1)$$

onde cada linha está composta de variáveis aleatórias permutáveis e fortemente correlacionadas que tomam valores no conjunto $\{0, 1\}$. O modelo está caracterizado por um parâmetro real $q \leq 2$, o qual também caracteriza a distribuição limite da variável aleatória $S_{q,n} = X_{q,n,1} + \cdots + X_{q,n,n}$, que é uma distribuição q -gaussiana (ver (1.38) e (1.43)). Mostramos que, se $q \geq 1$, quaisquer m variáveis aleatórias da n -ésima linha do arranjo tornam-se assintoticamente independentes quando $n \rightarrow \infty$ (ver subseção 1.4.2). Este resultado é paradoxal, pois intuitivamente poderíamos esperar que, como as variáveis aleatórias do arranjo são fortemente correlacionadas, qualquer subconjunto da n -ésima linha do arranjo deveria estar composta também de variáveis aleatórias fortemente correlacionadas. Este fenômeno pode estar relacionado ao suporte da distribuição limite de $S_{q,n}$, pois, quando dito suporte é compacto ($q < 1$), qualquer subconjunto da n -ésima linha do arranjo está de fato formada por variáveis aleatórias fortemente correlacionadas (ver subseção 1.4.1). Isto também pode ser verificado analiticamente no outro modelo probabilista que estudamos no capítulo 3, o qual dá origem a distribuições q -gaussianas de suporte compacto. Além disso, se $q \geq 1$ e consideramos um número de variáveis aleatórias da n -ésima linha do arranjo acima que cresce com n , notamos que as variáveis aleatórias escolhidas são fortemente correlacionadas mesmo no limite $n \rightarrow \infty$.

Possíveis trabalhos futuros relacionados aos resultados mencionados no parágrafo anterior incluiriam:

- estudar o comportamento assintótico de distribuições marginais em outros modelos probabilistas que apresentem distribuições q -gaussianas com $q \geq 1$ como distribuições limite;

- pesquisar se existe algum sistema físico (ou social) fortemente correlacionado que apresente o comportamento paradoxal mencionado no parágrafo inicial;
- implementar o experimento mencionado no final da subseção 1.4.2.

O outro modelo probabilista que analisamos consistiu em uma sequência $(X_{\alpha,n})_{n \geq 1}$ de variáveis aleatórias permutáveis fortemente correlacionadas que tomam valores no conjunto $\{0, 1\}$. Este modelo está caracterizado por um parâmetro real $\alpha > 0$ e apresenta distribuições q -gaussianas com $q = (\alpha - 2)/(\alpha - 1)$ como distribuições limite quando $\alpha > 1$. Mostramos que a sequência $X_{\alpha,1}, X_{\alpha,2}, \dots$ não obedece a lei dos grandes números, pois a distribuição de $T_{\alpha,n}/n$, $T_{\alpha,n} = X_{\alpha,1} + \dots + X_{\alpha,n}$, converge a uma distribuição beta com ambos parâmetros iguais a α (ver seção 3.3). Ainda assim analisamos o decaimento da função $\Delta_{\alpha,x}(n) = \mathbf{P}(T_{\alpha,n} \leq nx) - \lim_{m \rightarrow \infty} \mathbf{P}(T_{\alpha,m} \leq mx)$, $0 \leq x \leq 1$, quando n cresce. Mostramos que, se $x = 0$, a função $\Delta_{\alpha,0}(n)$ decai a zero como uma lei de potencia da forma $1/n^\alpha$ com um termo subdominante da forma $1/n^{\alpha+1}$, a qual pode ser bem aproximada por uma q' -exponencial com $q' = 1 + 1/\alpha$. Se $x \in (0, 1]$ e α é inteiro, encontramos expressões analíticas para cotas superior e inferior da função $\Delta_{\alpha,x}(n)$. Mostramos que estas cotas se aproximam de zero como uma lei de potencia da forma $1/n$ com um termo subdominante da forma $1/n^2$ independentemente do valor de α . Aqui também notamos que as cotas podem ser bem aproximadas por q -exponenciais com $q = 2$.

Como uma curiosidade podemos indagar se o modelo do arranjo triangular definido na seção 1.3 cumpre, ou não, a lei dos grande números. Para isto vamos analisar o comportamento da função

$$\tilde{\Delta}_{q,x}(n) = \mathbf{P}(S_{q,n} \leq nx) - \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}(T_{1+1/(1-q),x} \leq nx), \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (5.2)$$

quando n é grande. A definição da função $\tilde{\Delta}_{q,x}(n)$ envolve o limite de $\mathbf{P}(T_{1+1/(1-q),x} \leq nx]$, pois esperamos que se tenha

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}(S_{q,n} \leq nx) = \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}(T_{1+1/(1-q),x} \leq nx) \quad (5.3)$$

devido a que, de (1.43), se tem imediatamente que

$$n\mathbf{P}(S_{q,n} = k) \sim \frac{1}{B(\frac{2-q}{1-q}, \frac{2-q}{1-q})} \left(\frac{k+1}{n+2}\right)^{1/(1-q)} \left[1 - \left(\frac{k+1}{n+2}\right)\right]^{1/(1-q)} \quad (5.4)$$

quando $n \rightarrow \infty$ ($k = 0, 1, \dots, n$), que é basicamente a mesma relação que a variável aleatória $T_{1+1/(1-q),n}$ cumpre (ver 3.9). Um estudo numérico da função $\tilde{\Delta}_{q,x}(n)$ mostra que $\tilde{\Delta}_{q,x}(n) \rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$, o qual confirma (5.3) e implica que o arranjo triangular definido na seção 1.3 não cumpre a lei dos grandes números. A análise numérica também revela que as cotas da função $\Delta_{1+1/(1-q),x}(n)$ em geral não são cotas da função $\tilde{\Delta}_{q,x}(n)$ (ver figura 5.1).

Dos dois modelos probabilistas considerados podemos conjecturar que a lei dos grandes números pode não se cumprir em um sistema fortemente correlacionado que

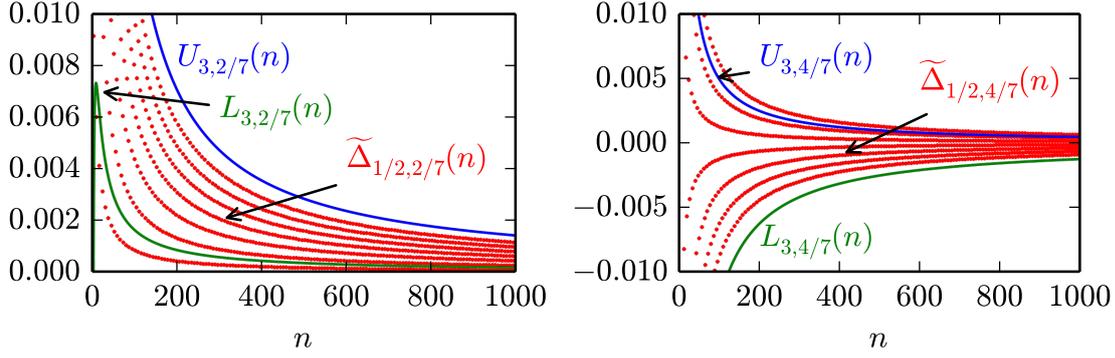


Figura 5.1: Representação da função $\tilde{\Delta}_{1/2,x}(n)$ para dois valores de x . (Esquerda) $x = 2/7$. (Direita) $x = 4/7$. Nota-se que as cotas da função $\Delta_{3,x}(n)$, encontradas analiticamente na subseção 3.4.4, não são cotas da função $\tilde{\Delta}_{1/2,x}(n)$.

apresenta distribuições limite de suporte compacto e que as correlações se preservam em qualquer parte finita do sistema. Um possível trabalho futuro consistiria na prova desta conjectura. Outro possível trabalho futuro seria indagar se o decaimento da probabilidade de grandes desvios é tipicamente da forma $1/n$ em sistemas fortemente correlacionados que apresentam distribuições limite de suporte compacto.

Deixando de lado os modelos probabilistas, no capítulo 4 trabalhamos no formalismo da mecânica estatística não extensiva com vistas a uma possível aplicação em sistemas clássicos hamiltonianos. Primeiramente definimos a entropia S_q em um contexto abstrato e provamos que ela está bem definida para toda distribuição absolutamente contínua em \mathbb{R}^d quando $q \neq 1$ (ver seção 4.1). Deixando o rigor de lado, extremizamos a entropia S_q para obtermos a distribuição que caracteriza o ensemble canônico da mecânica estatística não extensiva, previa generalização do conceito de energia interna (ver seção 4.3). Além de obtermos as relações termodinâmicas que aparecem na literatura sobre mecânica estatística não extensiva [46], apresentamos duas novas relações para o cálculo da energia interna como função do parâmetro β_q (ver subseção 4.4.1). Achemos que estas relações são de grande importância para o formalismo mecânica estatística não extensiva, pois a partir delas todas as funções relevantes (função de partição \bar{Z}_q , energia livre F_q , parâmetros $\bar{\beta}_q$ e β) podem ser calculadas.

A aplicação da mecânica estatística não extensiva ao modelo α -XY encontra-se nos seus inícios. A nossa proposta de abordagem utiliza a relação que existe entre as funções de partição da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs e da mecânica estatística não extensiva. A principal desvantagem desta abordagem é o fato de o cálculo analítico da função de partição de Boltzmann-Gibbs envolver a solução de uma equação transcendental, pois devido a isto não é possível continuarmos com os cálculos de forma analítica. Apesar das dificuldades, existe forte evidência da necessidade de utilizarmos a mecânica estatística não extensiva neste sistema,

assim como em outros sistemas clássicos hamiltonianos que apresentam interações de longo-alcance [12, 13, 76, 77]; por exemplo, o fato de aparecerem distribuições de momentos angulares não gaussianas [11].

Para finalizarmos é bom ressaltarmos que, tanto em sistemas clássicos hamiltonianos como em mapas conservativos (que preservam área), existe uma relação bastante clara entre a sensibilidade às condições iniciais, caracterizado pelo expoente de Lyapunov máximo, a intensidade das correlações e a aplicabilidade da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs [47, 76, 77, 78]. Se as correlações em um sistema são fracas, o expoente de Lyapunov máximo é positivo, o que implica que o sistema é quase insensível às condições iniciais. Desta maneira o sistema é ergódico e a mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs funciona corretamente. No entanto, se o expoente de Lyapunov máximo de um sistema é zero, o sistema tem memória, a mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs falha mas a mecânica estatística não extensiva pode funcionar. O estudo de modelos que apresentam um parâmetro de controle das correlações, como o α/d do modelo α -XY, permitem então visualizar a transição entre o regime boltzmanniano e o regime da mecânica estatística não extensiva [78].

Bibliografia

- [1] A.I. Khinchin: *Mathematical foundations of statistical mechanics*. Dover, New York, 1949. Citado na(s) página(s): 1, 8, 36
- [2] H. Touchette: *The large deviation approach to statistical mechanics*. Phys. Rep., 478:1, 2009. Citado na(s) página(s): 1, 22, 25
- [3] M.E. Vares: *Grandes desvios em processos markovianos*. IMPA, Rio de Janeiro, 1985. Citado na(s) página(s): 1, 22
- [4] E. Olivieri e M.E. Vares: *Large deviations and metastability*. Cambridge University Press, New York, 2005. Citado na(s) página(s): 1, 22, 24, 25, 26
- [5] R.S. Ellis: *Entropy, large deviations, and statistical mechanics*. Springer, Berlin, 1985. Citado na(s) página(s): 1, 22, 25
- [6] H. Touchette: *A basic introduction to large deviations: Theory, applications, simulations*. Em R. Leidl e A. K. Hartmann (editores): *Modern computational science 11: Lecture notes from the 3rd international Oldenburg summer school*. BIS-Verlag der Carl von Ossietzky Universität Oldenburg, 2011. Citado na(s) página(s): 1, 25
- [7] C. Tsallis: *Possible generalization of the Boltzmann-Gibbs statistics*. J. Stat. Phys., 52:479, 1988. Citado na(s) página(s): 1, 49
- [8] C. Tsallis: *Introduction to nonextensive statistical mechanics: approaching a complex world*. Springer, New York, 2009. Citado na(s) página(s): 1, 5, 28, 49, 50, 65
- [9] C. Tsallis e L.J.L. Cirto: *Thermodynamics is more powerful than the role to it reserved by Boltzmann-Gibbs statistical mechanics*. Eur. Phys. J. Special Topics, 223:2161, 2014. Citado na(s) página(s): 2
- [10] A. Pluchino, A. Rapisarda e C. Tsallis: *Nonergodicity and central-limit behavior for long-range Hamiltonians*. EPL, 80:26002, 2007. Citado na(s) página(s): 2, 55
- [11] L.J.L. Cirto, V.R.V. Assis e C. Tsallis: *Influence of the interaction range on the thermostatics of a classical many-body system*. Physica A, 393:286, 2014. Citado na(s) página(s): 2, 4, 55, 56, 65, 67, 72

- [12] H. Christodoulidi, C. Tsallis e T. Bountis: *Fermi-Pasta-Ulam model with long-range interactions: Dynamics and thermostatics*. EPL, 108:40006, 2014. Citado na(s) página(s): 2, 55, 56, 67, 72
- [13] L.J.L. Cirto, L.S. Lima e F.D. Nobre: *Controlling the range of interactions in the classical inertial ferromagnetic Heisenberg model: analysis of metastable states*. J. Stat. Mech., página P04012, 2015. Citado na(s) página(s): 2, 55, 56, 72
- [14] P. Douglas, S. Bergamini e F. Renzoni: *Tunable Tsallis distributions in dissipative optical lattices*. Phys. Rev. Lett., 96:110601, 2006. Citado na(s) página(s): 2
- [15] E. Lutz e F. Renzoni: *Beyond Boltzmann-Gibbs statistical mechanics in optical lattices*. Nature Physics, 9:615, 2013. Citado na(s) página(s): 2
- [16] B. Liu e J. Goree: *Superdiffusion and Non-Gaussian Statistics in a Driven-Dissipative 2D Dusty Plasma*. Phys. Rev. Lett., 100:055003, 2008. Citado na(s) página(s): 2
- [17] J.S. Andrade Jr., G.F.T. da Silva, A.A. Moreira, F.D. Nobre e E.M.F. Curado: *Thermostatistics of overdamped motion of interacting particles*. Phys. Rev. Lett., 105:260601, 2010. Citado na(s) página(s): 2
- [18] M.S. Ribeiro, F.D. Nobre e E.M.F. Curado: *Overdamped motion of interacting particles in general confining potentials: time-dependent and stationary-state analyses*. Eur. Phys. J. B, 85:399, 2012. Citado na(s) página(s): 2
- [19] M.S. Ribeiro, F.D. Nobre e E.M.F. Curado: *Time evolution of interacting vortices under overdamped motion*. Phys. Rev. E, 85:021146, 2012. Citado na(s) página(s): 2
- [20] C.Y. Wong e G. Wilk: *Tsallis fits to p_T spectra for pp colisions at the LHC*. Acta Phys. Polonica B, 43:2047, 2012. Citado na(s) página(s): 2
- [21] C.Y. Wong e G. Wilk: *Tsallis fits to p_T spectra and multiple hard scattering in pp collisions at the LHC*. Phys. Rev. D, 87:114007, 2013. Citado na(s) página(s): 2
- [22] L.J.L. Cirto, C. Tsallis, C.Y. Wong e G. Wilk: *The transverse-momenta distributions in high-energy pp collisions – A statistical-mechanical approach*. arXiv:1409.3278, 2014. Citado na(s) página(s): 2
- [23] D.J.B. Soares, C. Tsallis, A.M. Mariz e L.R. da Silva: *Preferential attachment growth model and nonextensive statistical mechanics*. Europhys. Lett., 70:70, 2005. Citado na(s) página(s): 2

- [24] C. Tsallis: *Connection between scale-free networks and nonextensive statistical mechanics*. Eur. Phys. J. Special Topics, 161:175, 2008. Citado na(s) página(s): 2
- [25] S.G.A. Brito, L.R. da Silva e C. Tsallis: *Role of dimensionality in complex networks: connection with nonextensive statistics*. arXiv=1509.07141, 2015. Citado na(s) página(s): 2
- [26] A. Upadhyaya, J.P. Rieu, J.A. Glazier e Y. Sawada: *Anomalous diffusion and non-Gaussian velocity distribution of hydra cells in cellular aggregates*. Physica A, 293:549, 2001. Citado na(s) página(s): 2
- [27] S. Umarov, C. Tsallis e S. Steinberg: *On a q -central limit theorem consistent with nonextensive statistical mechanics*. Milan J. Math., 76:307, 2008. Citado na(s) página(s): 2, 3, 8, 9, 10, 11
- [28] H.J. Hilhorst: *Note on a q -modified central limit theorem*. J. Stat. Mech., página P10023, 2010. Citado na(s) página(s): 2, 11
- [29] M. Jauregui e C. Tsallis: *q -generalization of the inverse Fourier transform*. Phys. Lett. A, 375:2085, 2011. Citado na(s) página(s): 2, 11
- [30] M. Jauregui, C. Tsallis e E.M.F. Curado: *q -moments remove the degeneracy associated with the inversion of the q -Fourier transform*. J. Stat. Mech., página P10016, 2011. Citado na(s) página(s): 2, 11
- [31] A. Plastino e M.C. Rocca: *Inversion of Umarov-Tsallis-Steinberg's q -Fourier transform and the complex-plane generalization*. Physica A, 391:4740, 2012. Citado na(s) página(s): 2, 11
- [32] M. Jauregui e C. Tsallis: *New representations of π and Dirac delta using the nonextensive-statistical-mechanics q -exponential function*. J. Math. Phys., 51:063304, 2010. Citado na(s) página(s): 2
- [33] A. Chevreuil, A. Plastino e C. Vignat: *On a conjecture about Dirac's delta representation using q -exponentials*. J. Math. Phys., 51:093502, 2010. Citado na(s) página(s): 2
- [34] M. Mamode: *Integral representation of Dirac distribution using the Tsallis q -exponential function*. J. Math. Phys., 51:123509, 2010. Citado na(s) página(s): 2
- [35] A. Plastino e M.C. Rocca: *A direct proof of Jauregui-Tsallis' conjecture*. J. Math. Phys., 52:103503, 2011. Citado na(s) página(s): 2
- [36] T. Amdeberhan, D. Borwein, J.M. Borwein e A. Straub: *On formulas for π experimentally conjectured by Jauregui-Tsallis*. J. Math. Phys., 53:073708, 2012. Citado na(s) página(s): 2

- [37] A. Rodríguez, V. Schwämmle e C. Tsallis: *Strictly and asymptotically scale invariant probabilistic models of N correlated binary random variables having q -Gaussians as $N \rightarrow \infty$ limiting distributions*. J. Stat. Mech., página P09006, 2008. Citado na(s) página(s): 2, 5, 12, 14, 31
- [38] R. Hanel, S. Thurner e C. Tsallis: *Limit distributions of scale-invariant probabilistic models of correlated random variables with the q -Gaussian as an explicit example*. Eur. Phys. J. B, 72:263, 2009. Citado na(s) página(s): 2, 31, 33
- [39] J. Ruseckas: *Probabilistic model of N correlated binary random variables and non-extensive statistical mechanics*. Phys. Lett. A, 379:654, 2015. Citado na(s) página(s): 2
- [40] G. Sicuro, P. Tempesta, A. Rodríguez e C. Tsallis: *On the robustness of the q -Gaussian family*. arXiv:1506.02136, 2015. Citado na(s) página(s): 2
- [41] G. Ruiz e C. Tsallis: *Towards a large deviation theory for strongly correlated systems*. Phys. Lett. A, 376:2451, 2012. Citado na(s) página(s): 3, 21, 28
- [42] G. Ruiz e C. Tsallis: *Reply to comment on “Towards a large deviation theory for strongly correlated systems”*. Phys. Lett. A, 377:491, 2013. Citado na(s) página(s): 3, 4, 21, 28, 29
- [43] J. Naudts e H. Suyari: *Large deviation estimates involving deformed exponential functions*. Physica A, 436:716, 2015. Citado na(s) página(s): 3, 28
- [44] M. Jauregui e C. Tsallis: *Paradoxical probabilistic behavior for strongly correlated many-body classical systems*. Phys. Lett. A, 379:1816, 2015. Citado na(s) página(s): 3, 5
- [45] M. Jauregui e C. Tsallis: *Convergence of the probability of large deviations in a model of correlated random variables having compact-support Q -Gaussians as limiting distributions*. J. Math. Phys., 56:023303, 2015. Citado na(s) página(s): 4, 31
- [46] C. Tsallis, R.S. Mendes e A.R. Plastino: *The role of constraints within generalized nonextensive statistics*. Physica A, 261:534, 1998. Citado na(s) página(s): 4, 57, 71
- [47] C. Anteneodo e C. Tsallis: *Breakdown of exponential sensitivity to initial conditions: Role of the range of interactions*. Phys. Rev. Lett., 80:5313, 1998. Citado na(s) página(s): 4, 65, 72
- [48] M. Antoni e S. Ruffo: *Clustering and relaxation in Hamiltonian long-range dynamics*. Phys. Rev. E, 52, 1995. Citado na(s) página(s): 4, 65, 66

- [49] A. Campa, A. Giansanti e D. Moroni: *Canonical solution of a system of long-range interacting rotators on a lattice*. Phys. Rev. E, 62:303, 2000. Citado na(s) página(s): 4, 65, 67
- [50] A. Campa, A. Giansanti e D. Moroni: *Metastable states in a class of long-range Hamiltonian systems*. Physica A, 305:137, 2002. Citado na(s) página(s): 4, 65
- [51] E.L. Lima: *Análise real: funções de uma variável*, volume 1. IMPA, Rio de Janeiro, 12ª edição, 2013. Citado na(s) página(s): 5, 14, 24, 38, 39
- [52] R. Durrett: *Probability: theory and examples*. Cambridge University Press, New York, 4ª edição, 2010. Citado na(s) página(s): 6, 8, 17
- [53] B. James: *Probabilidade: um curso a nível intermediário*. IMPA, Rio de Janeiro, 3ª edição, 2004. Citado na(s) página(s): 6, 11, 16, 21
- [54] E. Capelas de Oliveira: *Funções especiais com aplicações*. Editora Livraria da Física, São Paulo, 2005. Citado na(s) página(s): 6, 32
- [55] W. Rudin: *Principles of mathematical analysis*. McGraw-Hill, Singapore, 3ª edição, 1976. Citado na(s) página(s): 7, 43
- [56] C. Beck e F. Schlögl: *Thermodynamics of chaotic systems*. Cambridge University Press, 1993. Citado na(s) página(s): 9
- [57] L. Nivonen, A. Le Méhauté e Q.A. Wang: *Generalized algebra within a nonextensive statistics*. Rep. Math. Phys., 52:437, 2003. Citado na(s) página(s): 10
- [58] E.P. Borges: *A possible deformed algebra and calculus inspired in nonextensive thermostatistics*. Physica A, 340:95, 2004. Citado na(s) página(s): 10
- [59] M.C. Soares: *Cálculo em uma variável complexa*. IMPA, Rio de Janeiro, 5ª edição, 2014. Citado na(s) página(s): 10
- [60] W. Feller: *An introduction to probability theory and its applications*, volume 2. John Wiley & Sons, New York, 2ª edição, 1971. Citado na(s) página(s): 12
- [61] F. Caruso e C. Tsallis: *Nonadditive entropy reconciles the area law in quantum systems with classical thermodynamics*. Phys. Rev. E, 78:021102, 2008. Citado na(s) página(s): 16, 17
- [62] G. Vidal, J.I. Latorre, E. Rico e A. Kitaev: *Entanglement in quantum critical phenomena*. Phys. Rev. Lett., 90:227902, 2003. Citado na(s) página(s): 17
- [63] W. Feller: *An introduction to probability theory and its applications*, volume 1. John Wiley & Sons, New York, 3ª edição, 1968. Citado na(s) página(s): 23

Bibliografia

- [64] F. Acker e F. Dickstein: *Uma introdução à análise convexa*. IMPA, 1983. Citado na(s) página(s): 24
- [65] E.L. Lima: *Análise real: funções de n variáveis*, volume 2. IMPA, Rio de Janeiro, 6ª edição, 2013. Citado na(s) página(s): 25
- [66] H. Touchette: *Comment on “Towards a large deviation theory for strongly correlated systems”*. Phys. Lett. A, 377:436, 2013. Citado na(s) página(s): 29
- [67] G. Kaniadakis: *Non-linear kinetics underlying generalized statistics*. Physica A, 296:405, 2001. Citado na(s) página(s): 29
- [68] H. Bergeron, E.M.F. Curado, J.P. Gazeau e L.M.C.S. Rodrigues: *Symmetric generalized binomial distributions*. J. Math. Phys., 54:123301, 2013. Citado na(s) página(s): 31
- [69] E.T. Jaynes: *Information theory and statistical mechanics*. Phys. Rev., 106:620, 1957. Citado na(s) página(s): 36, 55
- [70] K. Huang: *Statistical Mechanics*. John Wiley & Sons, 2ª edição, 1987. Citado na(s) página(s): 36
- [71] P.J. Fernandez: *Medida e integração*. IMPA, Rio de Janeiro, 2ª edição, 2007. Citado na(s) página(s): 36, 50, 54
- [72] J.M. Patin: *A very short proof of Stirling’s formula*. Amer. Math. Monthly, 96:41, 1989. Citado na(s) página(s): 38
- [73] R. Courant: *Differential and integral calculus*, volume 1. Blackie & Son Limited, Glasgow, 2ª edição, 1937. Citado na(s) página(s): 44
- [74] H. Bergeron, E.M.F. Curado, J.P. Gazeau e L.M.C.S. Rodrigues: *Entropies of deformed binomial distributions*. arXiv:1412.0581, 2014. Citado na(s) página(s): 52
- [75] R. Courant e D. Hilbert: *Methods of mathematical physics*, volume 1. John Wiley & Sons, New York, 1989. Citado na(s) página(s): 56
- [76] A. Campa, A. Giansanti, D. Moroni e C. Tsallis: *Classical spin systems with long-range interactions: universal reduction of mixing*. Phys. Lett. A, 286:251, 2001. Citado na(s) página(s): 72
- [77] D. Bagci e C. Tsallis: *Sensitivity to initial conditions of d -dimensional long-range-interacting Fermi-Pasta-Ulam model: universal scaling*. arXiv:1509.04697, 2015. Citado na(s) página(s): 72
- [78] U. Tirnakli e E.P. Borges: *The standard map: from Boltzmann-Gibbs statistics to Tsallis statistics*. arXiv:1501.02459, 2015. Citado na(s) página(s): 72