



Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Departamento de Física Teórica

Tese de Doutorado

**Mecânica Estatística Não Extensiva e
Sistemas Hamiltonianos de
Longo Alcance
&
Aplicações Recentes de Entropias
Não Aditivas**

Leonardo José Lessa Cirto

Orientador: Constantino Tsallis

Rio de Janeiro

2016

Leonardo José Lessa Cirto

Mecânica Estatística Não Extensiva e Sistemas
Hamiltonianos de Longo Alcance
&
Aplicações Recentes de Entropias Não Aditivas

Tese apresentada ao programa de pós-graduação do Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF) como requisito à obtenção do grau de **Doutor em Física** sob a orientação de **Constantino Tsallis**.

Rio de Janeiro

2016

Leonardo José Lessa Cirto
Mecânica Estatística Não Extensiva e Sistemas Hamiltonianos de Longo Alcance
&
Aplicações Recentes de Entropias Não Aditivas

Banca Examinadora

*Prof. Dr. **Constantino Tsallis***

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas – CBPF

*Prof. Dr. **Airton Deppman***

Universidade de São Paulo – USP

*Prof. Dr. **Ernesto Pinheiro Borges***

Universidade Federal da Bahia – UFBA

*Prof. Dr. **Ivano Damião Soares***

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas – CBPF

*Prof. Dr. **Paulo Murilo Castro de Oliveira***

Universidade Federal Fluminense – UFF



Boltzmann trabalhando em seu novo *projeto* computacional. Qual a técnica? Dinâmica Molecular é evidente! Uma pena ele ainda usar Fortran 77.

Agradecimentos

Durante o doutorado submetemos, meu orientador e eu, um trabalho à *Nature*. Não foi aceito, havia uma interrogação no título. A ciência é aparentemente feita de certezas, refletimos depois, um paper com uma interrogação no título não poderia ser aceito, realmente. Não em uma revista de tamanho prestígio e abrangência entre o público em geral; certezas científicas devem ser preservadas nestes casos. Mas aqui estou falando baixinho, entre colegas, longe dos holofotes, posso, suponho, agir como cientista abandonando as certezas. Se essa postura não ficou transparente em algum ponto deste trabalho, foi por excesso de dúvidas, não de certezas. Deixemos as certezas [*I don't believe in atoms*] para os referees anônimos.

Para dirimir certezas, nada melhor que discussões com grandes mestres, e o CBPF é singular a esse respeito. Agradeço aqui àqueles que de algum modo contribuíram para a realização deste trabalho. Início pelos professores do grupo de física estatística Evaldo MF Curado, Fernando D Nobre e Sílvio M Duarte Queirós. Um agradecimento particular ao Prof. Evaldo por ter adquirido uma super máquina [a *Prometheus*] na qual muitos resultados desta tese foram produzidos [simular 10^6 partículas em MD não é mole, *Zeus* não daria conta]. Foram muitos os professores que visitaram o grupo nestes anos. Alguns, especialistas em temas que trataremos adiante, me deram importantes dicas. Agradeço portanto Alessandro Pluchino, Andrea Rapisarda, Antonio Rodríguez, Benedito JC Cabral, Ernesto P Borges, Grzegorz Wilk, Guiomar Ruiz, Roseli S Wedemann e Ugur Tirnakli. Também foram muitos os professores do CBPF com os quais tive o prazer de estudar ou discutir. Mas não posso deixar de agradecer Cássio Leite Vieira, Ivano Damião Soares, Nelson P Neto e Sebastião A Dias. Meu agradecimento mandatário a JA Helayël-Neto, um dos professores símbolos do CBPF, sempre com a sala cheia, de segunda a sexta, sábado ou feriado. Sobre a disciplina de Mecânica Quântica do Prof. Nelson, tenho que registrar que havia muito um curso e um livrinho[¶] não me impactavam tanto.

O CBPF é singular também pela estrutura. Agradeço ao Prof. Ricardo MO Galvão por direta ou indiretamente ter melhorado as condições de trabalho dos estudantes durante sua marcante gestão como diretor, e ao Prof. Ivan S Oliveira, outro símbolo do CBPF, por toda a ajuda da CFC. Todos da CAT, especialmente Marcelo Giovanni M Souza pela inestimável parceria na administração do cluster do INCT-SC e nossa *chefa* nos eventos de divulgação Denise Coutinho A Costa. Agradeço Cláudia Vanise, Elizabeth MA de Lemos e, embora tricolor, Almério V de Castro por esses anos de muito café e harmonioso convívio. Tenho que agradecer à dupla da CFC que carrega o peso do

[¶]N.P. Neto, *Teorias e Interpretações da Mecânica Quântica*. Em I.S. Oliveira, Coord., Vol. 09 da *Coleção CBPF: Tópicos de Física* (Editora Livraria da Física, São Paulo, 2010) [cento e poucas páginas].

setor burocrático da pós-graduação: Elisabete V de Souza & J de Almeida Ricardo.

Aos colegas e amigos por esses anos estudando-trabalhando-morando juntos, meu profundo agradecimento. Tenho que citar os estudantes do grupo Felipe TL Germani, Gabriela A Casas, João R Medeiros, Leonardo S Lima, Luciana A Rios, Maurício S Ribeiro [ganhando tubos no mercado e fazendo física de alto nível aos fins de semana], Maury D Correia [sou testemunha da importante conexão entre CBPF e CENPES promovida por ele], Sebastião TO Almeida, Vladimir RV Assis, e Zochil G Arenas. Os parceiros na organização do incrível ENAF 2012 Enrique Arias, Érico RP Novais e Max Jáuregui. Não posso esquecer Arthur C Scardua, Andréa LF Novais, Bruno G Silva & Thamys Abrahão, Cesar Raitz, Diego Lemelle, Eduardo HS Bittencourt & Grasiela B Santos, Isabel CS Dinóla, Jefferson LL Moraes, Jefferson G Filgueiras, Jeovani Brandão, Kim Veiga, Luisa A Scudeller, Marcos JP Alves & Carolina F Cerqueira, Martha MN Rodrigues, Mylena P Nascimento, N Linneu de Holanda, Pablo D Batista, Paulo R Soledade, Roberta Dutra, Rodrigo Turcati, Sadi Khodae e Saulo Machado & Naiara Y Klein.

Agradeço o apoio financeiro do CNPq [bolsa], CAPES e FAPERJ [computadores, impressora etc].

Por fim, e mais importante, agradeço ao orientador desta tese, **Constantino Tsallis**, que durante mais de 4 anos de convivência diária jamais deixou de me atender *imediatamente* quando eu aparecia em sua porta, e sempre com um sorriso no rosto. Aqueles que tiveram a oportunidade de acompanhar mesmo uma parcela do volume de desdobramentos de sua ideia, compreendem o significado deste ato.

Resumo

Este trabalho tem como linha mestra a Mecânica Estatística Não Extensiva e é dividido em duas partes. A primeira trata de sistemas de spins clássicos regidos pela seguinte função Hamiltoniana:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i^2 + \frac{J}{2\tilde{N}} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \frac{1 - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{r_{ij}^\alpha} \quad (J > 0)$$

O spin \mathbf{S}_i é um vetor de n componentes e o parâmetro α é responsável por regular o alcance da interação. Estudamos os casos particulares $n=2$ e $n=3$, que correspondem, respectivamente, ao modelo α -XY e ao modelo clássico de Heisenberg. A análise foi predominantemente numérica, por meio de simulações em Dinâmica Molecular, e em dimensão $d=1$. Com respeito ao modelo α -XY, foi investigada principalmente a influência de α na distribuição de velocidades do sistema. Verificamos que no regime de longo alcance $\alpha < d$, as distribuições são bem descritas por q -gaussianas, uma das assinaturas da termoestatística baseada na entropia não aditiva S_q . Quanto ao modelo de Heisenberg, investigamos a influência da energia, do parâmetro α e do tamanho do sistema N sobre o estado quase estacionário (QSS), estado caracterizado por valores de temperatura e magnetização distintos daqueles previstos pela mecânica estatística tradicional.

A segunda parte da tese discute o novo funcional entrópico S_δ , sua possível relação com a entropia de Bekenstein & Hawking de buracos negros e sua unificação com a entropia S_q , definindo a entropia de dois parâmetros $S_{q,\delta}$. São analisadas também distribuições de momento transversal de partículas produzidas em colisões pp medidas recentemente no LHC. É discutida uma modificação da teoria de Hagedorn consistente com a termoestatística não extensiva capaz de reproduzir analiticamente o comportamento dos dados experimentais.

Palavras-chave: Mecânica Estatística Não Extensiva, Entropias Não Aditivas, Modelos de Spins Clássicos com Interação de Longo Alcance, Dinâmica Molecular, Entropia de Buracos Negros, Colisões de Partículas Relativísticas.

Abstract

This work has as guideline the Nonextensive Statistical Mechanics and can be divided into two main parts. The first part deals with classical spin systems ruled by the following Hamiltonian:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i^2 + \frac{J}{2\tilde{N}} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \frac{1 - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{r_{ij}^\alpha} \quad (J > 0)$$

The spin \mathbf{S}_i is a vector with n components and the parameter α controls the interaction range. We studied the particular cases $n=2$ and $n=3$, corresponding to the α -XY and classical Heisenberg models respectively. Our analysis were mainly numerical, through molecular dynamics simulations, and we have considered $d=1$ dimension. Regarding the α -XY model, we focused on the effect of α on the velocity distribution of the system. It was verified that in the long-range regime $\alpha < d$ the distributions are well described by q -gaussians, one of the landmarks of a thermostatics based upon the nonadditive entropy S_q . For the classical Heisenberg model, we investigated the effect of the energy, the parameter α and system size N on the quasi stationary state (QSS) whose values of temperature and magnetization differ from those predicted within traditional statistical mechanics.

The second part of the thesis covers the new entropic functional S_δ , its possible relationship with the Bekenstein & Hawking entropy of black holes and its unification with the entropy S_q , thus forming the entropy of two parameters $S_{q,\delta}$. We also analyze the hadronic transverse momentum distributions in pp collisions at the LHC. We discuss a modification of the Hagedorn's theory consistent with nonextensive thermostatics able to reproduce the observed experimental data.

Keywords: Nonextensive Statistical Mechanics, Nonadditive Entropies, Classical Spin Models with Long-Range Interaction, Molecular Dynamics, Black Hole Entropy, High Energy Collisions.

Lista de Tabelas

- 6.1 Relação entre classe de correlação e extensividade da entropia. 87
- 6.2 Parâmetros do ajuste q -exponencial dos dados do LHC. 103

Lista de Figuras

1.1	Ilustração das funções q -gaussiana e q -exponencial.	7
2.1	Solução analítica dos modelos α -XY e α -Heisenberg para $0 \leq \alpha/d < 1$ e $\alpha \rightarrow \infty$	15
3.1	Ilustração da conjectura de Tsallis.	22
4.1	Resultados numéricos e solução analítica do modelo α -XY unidimensional para $0 \leq \alpha < 1$ e $\alpha \rightarrow \infty$	28
4.2	Evolução temporal da temperatura cinética $T(t)$ e do módulo do vetor magnetização $M(t)$ para $(U, N) = (0.69, 30\ 000)$ e valores de α entre $\alpha \in [0.0, 0.5]$	31
4.3	Temperatura cinética $T(t)$ para $(U, N) = (0.69, 200\ 000)$ e $\alpha \in [0.6, 10.0]$	32
4.4	Classes de estados quase estacionários.	35
4.5	Ilustração do Teorema Central do Limite.	37
4.6	Distribuição de velocidades do modelo α -XY para $(U, N, \tau) = (0.69, 1\ 000\ 000, 1.0)$ e dois valores de α : $\alpha = 0.90$ e $\alpha = 2.0$	39
4.7	Distribuição de velocidades para $(U, N, \tau) = (0.69, 30\ 000$ e $200\ 000, 1.0)$ e α variando entre $\alpha \in [0.0, 1.75]$	40
4.8	Comportamento de q_n , β_{q_n} e T_{kin} em função de α	42
4.9	Kurtosis convencional $\kappa_1(q)$ e q -kurtosis $\kappa_q(q)$ da distribuição q -gaussiana.	45
4.10	q -kurtosis calculada numericamente a partir dos histogramas da distribuição de velocidades.	47
4.11	Temperatura cinética $T(t)$ e distribuições de velocidades para vários intervalos Δt e $(U, N, \alpha, \tau) = (0.69, 200\ 000, 0.70, 1.0)$	49
4.12	Temperatura cinética $T(t)$ e distribuições de velocidades para vários intervalos Δt e $(U, N, \alpha, \tau) = (0.69, 200\ 000, 0.80, 1.0)$	50
4.13	Temperatura cinética $T(t)$ e distribuições de velocidades para vários intervalos Δt e $(U, N, \alpha, \tau) = (0.69, 200\ 000, 1.35, 1.0)$	51
4.14	Temperatura cinética $T(t)$ e distribuições de velocidades para vários intervalos Δt e $(U, N, \alpha, \tau) = (0.69, 1\ 000\ 000, 0.90, 1.0)$	52
4.15	Distribuição no QSS: Temperatura $T(t)$ e distribuições de velocidades para vários intervalos Δt e $(U, N, \alpha, \tau) = (0.69, 300\ 000, 0.99, 1.0)$	53
4.16	Distribuição no QSS: Temperatura $T(t)$ e distribuições de velocidades para vários intervalos Δt e $(U, N, \alpha, \tau) = (0.69, 1\ 000\ 000, 0.99, 1.0)$	54
4.17	Expoente de Lyapunov λ_{max}	55
4.18	Temperatura $T(t)$ para $(N, \alpha, U) = (200\ 000, 0.90$ e $1.35, 0.69$ e $0.90)$	56

4.19	Comportamento de q_n em função do intervalo τ .	57
4.20	Distribuição de velocidades para $(N, \alpha, U) = (200\,000, 0.90 \text{ e } 1.35, 0.90)$ e $\tau \in [1, 10\,000]$.	58
4.21	Distribuição de velocidades para $(N, \alpha, U) = (200\,000, 0.90 \text{ e } 1.35, 0.69)$ e $\tau \in [1, 10\,000]$.	59
4.22	Comparação entre média temporal e média sobre realizações.	60
4.23	Temperatura $T(t)$ e magnetização $M(t)$ para $(U, N, \alpha) = (0.69, 1\,000\,000, 0.90 \text{ e } 2.0)$.	62
4.24	Distribuição dos ângulos: registro único.	63
4.25	Distribuição dos ângulos: média temporal.	64
4.26	q como função da carga central c para o modelo XY quântico.	67
5.1	Resultados numéricos e solução analítica do modelo α -Heisenberg unidimensional para $0 \leq \alpha < 1$ e $\alpha \rightarrow \infty$.	70
5.2	Evolução da temperatura cinética $T(t)$ para $E/N = U$ e N fixos e diversos valores de α no intervalo $\alpha \in [0.0, 10.0]$.	74
5.3	Duração do QSS t_{QSS} em função de α .	75
5.4	Evolução da temperatura cinética para $N = 10\,000$, três valores de α na região de longo alcance e energia variando no intervalo $0.70 \leq U < U_c \approx 0.833$.	77
5.5	Duração do QSS t_{QSS} em função da energia U .	78
5.6	Parte do gráfico T vs. U destacando o intervalo de energia no qual QSS's são observados. Para $U < 0.70$, temos uma região de calor específico negativo.	79
5.7	Evolução de $T(t)$ para $U = 0.76$ fixo, três valores de $\alpha < 1$ e tamanho variando de $N = 2\,500$ até $N = 30\,000$.	80
5.8	Crescimento do tempo de vida t_{QSS} em função do número de rotores N .	81
6.1	Entropia $S_\delta = S_\delta(p)$ de um sistema binário em função da probabilidade p e em função de p e δ .	86
6.2	Função $s(p, q, \delta)$ para algumas combinações de q e δ .	88
6.3	Entropia $S_{q,\delta} = S_{q,\delta}(p)$ em função de p de um sistema binário.	89
6.4	Derivada segunda das funções $s(p, q, \delta)$ e $s(1 - p, q, \delta)$ e da entropia $S_{q,\delta}$ para um sistema binário.	90
6.5	Espaço de parâmetros da entropia $S_{q,\delta}$ indicando as regiões côncavas.	92
6.6	Entropia $S_{q,\delta} = S_{q,\delta}(p_1, p_2)$, representação parametrizada, e $S_{q,\delta} = S_{q,\delta}(p) = S_{q,\delta}(p, 1-p)$ de um sistema binário.	93
6.7	Seção de choque diferencial invariante em função do momento transversal p_T de hádrons produzidos em colisões pp .	99

Sumário

Agradecimentos	iv
Resumo	vi
Abstract	vii
Lista de Tabelas	viii
Lista de Figuras	ix
1 Introdução	1
1.1 Mecânica Estatística Não Extensiva	1
1.1.1 Otimizando a Entropia S_q	5
1.2 Entropia S_δ	8
2 Modelos Inerciais de Spins Clássicos	9
2.1 Introdução	9
2.2 Sobre o Alcance da Interação	9
2.3 Sistemas de Spins Inerciais	11
2.3.1 Solução Canônica	12
3 Escalamento de Sistemas Não Extensivos	17
3.1 Introdução	17
3.2 Escalamento de Tsallis	17
3.3 Conjectura de Tsallis	20
3.4 Sobre o Limite Termodinâmico	23
4 Rotores XY ($n = 2$)	26
4.1 Modelo α -XY	26
4.2 Equações de Movimento e Procedimento Numérico	29
4.3 Temperatura e Magnetização: Evolução e Média Temporal	30
4.4 Sobre o Estado Quase Estacionário (QSS)	33
4.4.1 Classes de QSS's	34
4.5 q -Generalização do Teorema do Limite Central	36
4.6 Distribuição de Velocidades	38
4.6.1 Comportamento de q em Função de α	39

4.7	q -Kurtosis e Média de Escort	43
4.7.1	q -Kurtosis: Resultados Numéricos	47
4.8	Influência da Duração do Intervalo Δt	48
4.9	Influência da Região: Distribuição no QSS	53
4.10	Sobre o Expoente de Lyapunov	54
4.11	Comportamento de q em Função do Intervalo τ	56
4.12	Médias sobre Realizações	59
4.13	Sobre a Distribuição Angular	61
4.14	q de Primeiros Princípios	64
4.14.1	Um Exemplo Quântico	66
5	Rotores de Heisenberg ($n = 3$)	68
5.1	Modelo α -Heisenberg	68
5.2	Equações de Movimento	71
5.3	Procedimento Numérico e Condições Iniciais	72
5.4	Temperatura e Magnetização: Evolução e Média Temporal	73
5.5	Influência de α no QSS	74
5.6	Influência de U no QSS	76
5.7	Influência de N no QSS	80
5.8	Sumário e Perspectivas	82
6	Aplicações Recentes de Entropias Não Aditivas	84
6.1	Classe de Correlação e Entropia	84
6.2	Entropia $S_{q,\delta}$	87
6.2.1	Análise da Concavidade	89
6.3	Entropia S_δ e Buracos Negros	93
6.4	Entropia S_q e Altas Energias	96
7	Comentários Finais	104
A	Programas Utilizados	106
	Referências Bibliográficas	107

Capítulo 1

Introdução

Este trabalho é baseado na mecânica estatística não extensiva e em ideias dela derivadas. Sua maior parte é dedicada a sistemas inerciais de spins clássicos com interação de longo alcance [Caps. 2, 3, 4 e 5], mas buracos negros e colisões de partículas elementares também são analisados [Cap. 6]. O desenvolvimento da tese originou os artigos [1–8]; mencioná-los no início ajudará a identificá-los no decorrer do texto pela numeração. Antes de apresentar os modelos específicos, discutiremos aqui na introdução um pouco sobre a mecânica estatística não extensiva. Alguns pontos abordados neste capítulo podem ser acessados na Ref. [1].

1.1 Mecânica Estatística Não Extensiva

A mecânica estatística não extensiva nasceu com o trabalho de C. Tsallis publicado em 1988 [9]. Hoje conhecida por grande parte da comunidade de físicos, essa teoria assenta-se na generalização do funcional entrópico introduzido por Boltzmann e em uma importante premissa: sistemas termodinâmicos devem ter entropia extensiva. Atualmente é desafiador qualquer revisão ampla da mecânica estatística não extensiva em uma tese de doutorado, por dois motivos. Primeiro em razão do volume acumulado de resultados, compreendendo diversas áreas, crescendo ano a ano[¶]. E segundo porque em 2009 foi publicado o livro do formulador da teoria [10], que de forma única expõe seus fundamentos e motivações e abarca seus desenvolvimentos até então. Faremos portanto uma breve exposição direcionada, aprofundando alguns temas específicos no momento apropriado, priorizando resultados mais recentes que não constem no livro.

Mas, afinal, o que foi generalizado no trabalho de 1988?

A termodinâmica em grande medida é a teoria de fenômenos do cotidiano. Muitas de suas variáveis e aplicações [volume, pressão; refrigerador, máquina a vapor] são familiares tanto para cientistas quanto não cientistas. É amplamente conectada com as leis físicas fundamentais e é relevante em muitas áreas, de partículas elementares a astrofísica. Embora falemos em *Leis Termodinâmicas*, a termodinâmica não é propriamente um conjunto de Leis Fundamentais da Natureza exatamente no mesmo sentido em que as Leis de Newton ou as equações de Maxwell o são. Estamos nos referindo ao fato da termodinâmica ser generalista, não reivindicar primazia de aplicabilidade sobre nenhum sistema específico, sendo consistente com todas essas leis e em certo sentido abrangê-las [11, 12]. Um dos principais interesses da termodinâmica é a relação entre variáveis macroscópicas, como, por exemplo, a lei de Boyle-Mariotte $P \propto 1/V$. Atualmente é entendido que tais relações são consisten-

[¶]Bibliografia permanentemente atualizada: <http://tsallis.cat.cbpf.br/TEMUCO.pdf>

tes com as leis microscópicas subjacentes que governam os constituintes do sistema, e, muitas vezes, são independentes das particularidades do modelo considerado. Entre a descrição microscópica de um sistema físico e suas relações termodinâmicas macroscópicas, há a mecânica estatística.

O principal objetivo da mecânica estatística é, partindo das leis microscópicas fundamentais que regem o sistema [mecânica clássica, relativística, quântica, cromodinâmica] adequadamente combinadas com teoria de probabilidade, chegar às relações termodinâmicas macroscópicas. No caminho dessa conexão entre os mundos micro e macro, o derradeiro passo envolve o conceito de entropia. Feita por Boltzmann durante as últimas três décadas do século XIX contra uma correnteza de críticas, esta descoberta é certamente uma das mais importantes e fecundas realizações das ciências naturais. O resultado de Boltzmann, atualmente conhecido por cientistas de diversas áreas e esculpido em sua lápide em Viena:

$$S_{BG} = k_B \ln W \quad (1.1)$$

é a conexão matemática entre as propriedades microscópicas finas do sistema físico [representadas por W , o total de microestados acessíveis] e as quantidades macroscópicas mensuráveis [representadas por S_{BG} , a mesma grandeza introduzida por Clausius a fim de completar a termodinâmica]. A Eq. (1.1) foi explicitamente escrita assim por Planck, mas era claramente conhecida de Boltzmann. O índice “G” responde por Gibbs, que ampliou e levou as ideias de Boltzmann adiante, espalhando os conceitos da mecânica estatística através de seu importante livro de 1902 [13], ano anterior a sua morte. A Eq. (1.1) é o resultado particular da expressão mais geral popularizada por Shannon:

$$S_{BG} = -k_B \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i = k_B \sum_{i=1}^W p_i \ln \frac{1}{p_i} \quad (1.2)$$

Com microestados equiprováveis, quer dizer, quando $p_i = 1/W \forall i$, a Eq. (1.1) é recuperada. Evidentemente a mecânica quântica era desconhecida de Boltzmann e apenas nascia quando o livro de Gibbs saiu do prelo. Foi trabalho de von Neumann estender a Eq. (1.2) para sistemas quânticos por meio da matriz densidade $\hat{\rho}$:

$$S_{BG} = -k_B \text{Tr} [\hat{\rho} \ln \hat{\rho}]$$

Dependendo do contexto em que o conceito de entropia aparece, essas equações são chamadas entropia de Boltzmann, de Gibbs, de Shannon, ou entropia de von Neumann, ou combinações desses nomes. Aqui chamaremos entropia de Boltzmann-Gibbs, e a mecânica estatística sobre ela construída, mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs. A otimização da entropia de Boltzmann-Gibbs submetida a vínculos apropriados fornece as distribuições de equilíbrio cujas consequências são consistentes com a termodinâmica.

Uma premissa importante para uma adequada conexão com a termodinâmica via entropia de Boltzmann-Gibbs é a independência dos N constituintes microscópicos do sistema, acarretando em um número de possibilidades W multiplicativo: $W = \mu^N$, com $\mu > 1$. Essa condição nem sempre é colocada de forma clara, e uma de suas consequências é que a entropia S_{BG} além de *aditiva* é também

extensiva[¶]. Com efeito, subdividindo o sistema em duas partes A e B tal que $W = W^A W^B = \mu^N$, vem:

$$S_{\text{BG}}(A + B) = S_{\text{BG}}(A) + S_{\text{BG}}(B) = Nk_B \ln \mu$$

expressão manifestamente aditiva e extensiva. Independência não é regra em modelos físicos de muitos corpos. Porém, para que S_{BG} seja extensiva, é suficiente independência assintótica, no sentido que $W \sim \mu^N$ quando $N \rightarrow \infty$, de modo que a definição mais comumente usada de extensividade se escreve:

$$0 < \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{S_{\text{BG}}}{N} < \infty$$

Em outras palavras: uma entropia extensiva é proporcional ao tamanho N do sistema no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, donde se depreende a importância da extensividade para a termodinâmica. Aceitar a formulação de Boltzmann-Gibbs como única permitida implica que qualquer modelo abordado tenha configurações microscópicas escalando com N na forma $W \sim \mu^N$, uma exigência bastante forte. Cumprida em sistemas independentes [spins não interagentes, gás ideal] ou fracamente correlacionados, tipicamente sistemas clássicos com interação de curto alcance ou quânticos pouco emaranhados, cujos microestados são explorados tal que a hipótese ergódica se justifique. É concebível que existam sistemas físicos cujas correlações entre seus componentes sejam fortes o suficiente para restringir os estados acessíveis de modo que um funcional diferente de S_{BG} seja necessário para uma adequada conexão com a termodinâmica.

O trabalho de 1988 [9] introduziu o funcional entrópico não aditivo:

$$S_q = -\frac{k_B}{1-q} \left[1 - \sum_{i=1}^W p_i^q \right] = k_B \sum_{i=1}^W p_i \ln_q \frac{1}{p_i} \quad (1.3)$$

O parâmetro q é em princípio real, e a função $\ln_q x = [x^{1-q} - 1]/[1 - q]$ é a q -generalização do logaritmo. Com microestados igualmente prováveis, a Eq. (1.3) acima fica:

$$S_q = -\frac{k_B}{1-q} [1 - W^{1-q}] = k_B \ln_q W \quad (1.4)$$

que corresponde ao extremo de S_q [$dS_q = 0 \Rightarrow p_i = 1/W \forall i$], máximo se $q > 0$ ou mínimo se $q < 0$. No limite $q \rightarrow 1$ o q -logaritmo se reduz ao logaritmo usual e as Eqs. (1.1) e (1.2) são recuperadas. A entropia S_q é não aditiva. Subdividindo um sistema de N componentes independentes em duas

[¶]Callen [11, Pág. 331] a expressa de modo claro, mas não como premissa: “(...) *The entropy is additive (extensive), whereas the number of microstates is multiplicative. The number of microstates available to two systems is the product of the numbers available to each (the number of “microstates” of two dice is $6 \times 6 = 36$). To interpret the entropy, then, we require an additive quantity that measures the number of microstates available to a system. The (unique!) answer is to identify the entropy with the logarithm of the number of available microstates (the logarithm of a product being the sum of the logarithms) (...)*”. E então segue a Eq. (1.1). Notar a união absolutamente comum entre os conceitos *aditivo* e *extensivo*. Possivelmente tal confusão tenha levado Salinas [14, Pág. 123] a afirmar que a “*A entropia de Tsallis não é aditiva e não pode, portanto, ser aplicada a problemas de interesse termodinâmico*”. Mesmo Tsallis não havia escapado dela ao menos até 2004, vide título de [15].

partes A e B tal que $W = W^A W^B = \mu^N$, é imediato verificar que:

$$S_q(A + B) = S_q(A) + S_q(B) + \frac{1 - q}{k_B} S_q(A) S_q(B) = k_B \ln_q \mu^N$$

Portanto, para sistemas independentes [ou aqueles em que $W \sim \mu^N$], além de não aditiva, a entropia S_q é não extensiva. A extensividade é recuperada somente quando $q \rightarrow 1$, *i.e.*, somente com a entropia de Boltzmann-Gibbs $S_1 = S_{BG}$.

Agora, seja um sistema correlacionado tal que o número de microestados escale com N na forma $W \sim N^\rho$, com $\rho > 0$. Confrontando com a situação anterior, notamos que $N^\rho \ll \mu^N$ para N grande [de fato, $N^\rho / \mu^N = 0$ no limite $N \rightarrow \infty$]. Para sistemas assim, a entropia aditiva S_{BG} é não extensiva, ao passo que a entropia não aditiva S_q , mediante escolha apropriada do índice q , pode ser extensiva. Efetivamente, da Eq. (1.4) vem:

$$S_q = k_B \ln_q W = -\frac{k_B}{1 - q} [1 - W^{1-q}] \sim N^{\rho(1-q)}$$

Logo, escolhendo $q = 1 - 1/\rho$, obtemos $S_q \propto N$. Esse resultado é o coração da mecânica estatística não extensiva e representa uma mudança de paradigma: buscando uma entropia termodinâmica extensiva, o funcional entrópico é ditado pelo modelo, pela forma como seus elementos microscópicos se associam.

Não há receita para determinar quando uma entropia diferente de S_{BG} deve ser usada. Com as evidências acumuladas, podemos aventar cenários gerais. Os sistemas para os quais a termoestatística de Boltzmann-Gibbs é sabidamente válida são tipicamente aqueles com interação de curto alcance, pouco correlacionados temporal ou espacialmente, fortemente caóticos [expoente de Lyapunov positivo]; são sistemas ergódicos, que ocupam os estados acessíveis de modo que S_{BG} seja proporcional ao seu tamanho. Sem muito rigor, podemos classificá-los de simples. Esperamos, por outro lado, que a termoestatística generalizada seja necessária na abordagem de sistemas com interação de longo alcance, fortemente correlacionados, fracamente caóticos [Lyapunov zero]; sistemas que possivelmente violem a ergodicidade, explorando parcialmente o espaço de fases, o qual talvez seja melhor descrito pela geometria fractal. São algumas vezes chamados de complexos. O nome *mecânica estatística não aditiva* evitaria pequenas confusões iniciais sobre o teor da teoria. Por razões históricas contudo, a termoestatística construída sobre S_q é conhecida como não extensiva. Após o primeiro contato notamos que a denominação corrente também é precisa. Afinal, esperamos utilizar S_q em sistemas para os quais S_{BG} não é adequada exatamente por não ser extensiva. Ademais, sistemas clássicos com interação de longo alcance, candidatos a serem tratados por essa teoria, têm energia não extensiva, como discutiremos no próximo capítulo.

Principalmente quando $q > 0$, a entropia S_q compartilha muitas propriedades com S_{BG} [*e.g.*, extensividade, concavidade; ambas são estáveis, não negativas e apresentam produção finita de entropia por unidade de tempo], algumas não presentes em outros funcionais, como, por exemplo, o de Renyi[¶] [ver Cap. 3 de [10], particularmente a tabela na Pág. 106]. A ideia originada em [9]

[¶]Tsallis comenta em palestras que sua generalização é *minimalista*. A fim de generalizar um conceito, algo deve ser modificado. A modificação pode ser grande ou pequena. Com respeito S_{BG} , a entropia S_q viola a aditividade, mas, dependendo do valor de q , mantém muitas propriedades em comum, e, nesse sentido, é minimalista.

teve muitos desdobramentos [16]. Evidências de sua utilidade surgiram em áreas sem ligação óbvia com a termodinâmica [*e.g.*, redes complexas, geofísica, finanças, biologia], e foi motivadora da generalização de estruturas matemáticas importantes à mecânica estatística, como o Teorema Central do Limite (CLT), abordado na Sec. 4.5, Pág. 36, e a Teoria dos Grandes Desvios. No Cap. 3 discutiremos a necessidade de uma entropia extensiva por razões ligadas às transformações de Legendre da termodinâmica, mas outros resultados merecem menção. Por exemplo, a Teoria dos Grandes Desvios compõe os fundamentos matemáticos da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs e é consistente com a extensividade da entropia [artigo de revisão [17]]. Resultados recentes com sistemas fortemente correlacionados [18–21] indicam a pertinência de uma q -generalização desta teoria em harmonia com a mecânica estatística não extensiva. Também, em regiões caóticas de sistemas não lineares simples [*e.g.*, mapa logístico], verifica-se que S_{BG} cresce linearmente com o tempo. No entanto, quando o expoente de Lyapunov se anula [*e.g.*, ponto de Feigenbaum], essa linearidade é alcançada com S_q para um valor específico de $q \neq 1$. Considerando que em sistemas dinâmicos assim, tempo e N têm papéis análogos, esse comportamento se alinha com o requerimento de uma entropia extensiva [ver Cap. 5 de [10] e [22–26] com resultados recentes]. Revelador é o aparecimento nas regiões de Lyapunov nulo de q -gaussianas, uma das consequências da termoestatística baseada na otimização de S_q .

1.1.1 Otimizando a Entropia S_q

Tendo em vista um sistema Hamiltoniano de n graus de liberdade, modelo de interesse em capítulos subsequentes, o jogo de probabilidades discreto $\{p_i\}$ deve ser substituído por uma função contínua das variáveis canonicamente conjugadas p_i e q_i , de modo que a entropia (1.2) se escreve:

$$S_{BG} = -k_B \int d\Gamma \rho(p, q) \ln [\rho(p, q)] \quad (1.5)$$

$d\Gamma = dq_1 \dots dq_n dp_1 \dots dp_n$ representa o elemento de volume no espaço de fases, e $\rho(p, q)$ a densidade de probabilidade normalizada:

$$\int d\Gamma \rho(p, q) = 1 \quad [\text{notação: } \rho(p, q) = \rho(q_1, q_2, \dots, q_n; p_1, p_2, \dots, p_n)] \quad (1.6)$$

Vamos introduzir o vínculo genérico:

$$\int d\Gamma \rho(p, q) \mathcal{A}(p, q) = \langle \mathcal{A} \rangle \quad (1.7)$$

Otimizando a entropia (1.5) submetida aos vínculos (1.6) e (1.7), obtemos[¶] a distribuição mais provável [β é o multiplicador de Lagrange associado à Eq. (1.7)]:

$$\rho(p, q) = e^{-\beta \mathcal{A}(p, q)} / \int d\Gamma e^{-\beta \mathcal{A}(p, q)} \quad (1.8)$$

[¶]Explicitamente: usando os vínculos (1.6) e (1.7), monta-se o funcional $\Phi[\rho] = S_{BG} - \lambda k_B \int d\Gamma \rho(p, q) - \beta k_B \int d\Gamma \rho(p, q) \mathcal{A}(p, q)$, em que λ e β são multiplicadores de Lagrange. Igualando a zero a derivada funcional, $\delta\Phi/\delta\rho = -\ln\rho - 1 - \lambda - \beta\mathcal{A} = 0$, depois eliminando λ por meio de (1.6), segue a Eq. (1.8). Por não afetar a discussão, consideramos o espaço de fases adimensional e omitimos o fator de contagem correta de Boltzmann normalmente necessário em sistemas clássicos.

Escolhendo $\mathcal{A}(p, q)$ como a função Hamiltoniana, $\mathcal{A} = \mathcal{H}(p, q)$, e identificando $\beta = 1/k_B T$, obtemos o peso de Boltzmann:

$$\rho(p, q) = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}(p, q)}}{Z} \quad \text{com:} \quad Z = \int d\Gamma e^{-\beta \mathcal{H}(p, q)} \quad (1.9)$$

Escolhendo $\mathcal{A}(p, q) = p_i^2/2$, *i.e.*, um dos momentos generalizados, e integrando sobre as demais coordenadas, obtemos a distribuição Maxwelliana:

$$P(p) = P_0 e^{-\beta p^2/2} = \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} e^{-\beta p^2/2} \quad [\text{notação: } P(0) = P_0] \quad (1.10)$$

Agora, avaliemos a entropia S_q :

$$S_q = -\frac{k_B}{1-q} \left\{ 1 - \int d\Gamma [\rho(p, q)]^q \right\} = k_B \int d\Gamma \rho(p, q) \ln_q \frac{1}{\rho(p, q)} \quad (1.11)$$

A otimização de S_q é mais delicada no que concerne à escolha dos vínculos. Atualmente é entendido que a normalização (1.6) deve ser mantida mas o vínculo (1.7) substituído por:

$$\int d\Gamma \rho_q(p, q) \mathcal{A}(p, q) = \langle \mathcal{A} \rangle_q \quad (1.12)$$

$\rho_q(p, q)$ representa uma nova densidade de probabilidade, também normalizada, associada à original via:

$$\rho_q(p, q) = [\rho(p, q)]^q / \int d\Gamma [\rho(p, q)]^q$$

A expressão acima envolve o conceito de *média de escort*, ferramenta importante na mecânica estatística não extensiva que será discutida mais detalhadamente na Sec. 4.7, Pág. 43. A densidade de probabilidade que otimiza a entropia (1.11) submetida aos vínculos (1.6) e (1.12) se escreve então como:

$$\rho(p, q) = e_q^{-\beta_q \mathcal{A}(p, q)} / \int d\Gamma e_q^{-\beta_q \mathcal{A}(p, q)}$$

$e_q^{\pm x} = [1 \pm (1-q)x]^{1/(1-q)}$ representa a q -generalização da exponencial [inversa do q -logaritmo]. O parâmetro β_q não é o multiplicador de Lagrange β associado ao vínculo (1.12), mas está ligado a ele via:

$$\beta_q = \beta'_q [1 + (1-q)\beta'_q \langle \mathcal{A} \rangle_q]^{-1} \quad \text{e:} \quad \beta'_q = \beta / \int d\Gamma [\rho(p, q)]^q$$

Escolhendo $\mathcal{A}(p, q)$ como a função Hamiltoniana, obtemos a generalização do peso de Boltzmann e da função de partição:

$$\rho(p, q) = \frac{e_q^{-\beta_q \mathcal{H}(p, q)}}{Z_q} \quad \text{com:} \quad Z_q = \int d\Gamma e_q^{-\beta_q \mathcal{H}(p, q)} \quad (1.13)$$

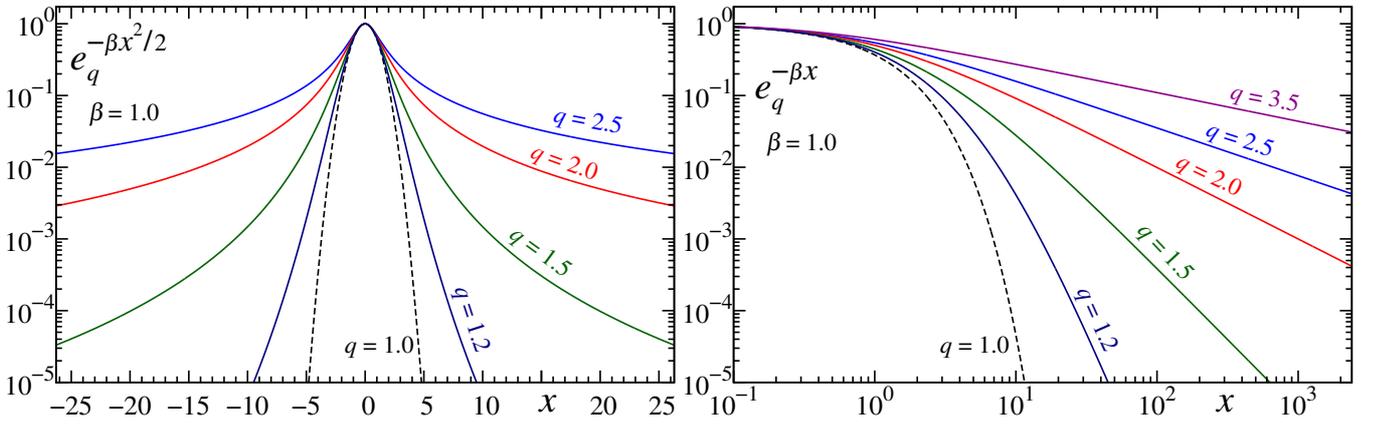


Fig. 1.1: Ilustração da função q -gaussiana $e_q^{-\beta x^2/2} = [1 - (1 - q)\beta x^2/2]^{1/(1-q)}$ [esquerda] e da q -exponencial $e_q^{-\beta x} = [1 - (1 - q)\beta x]^{1/(1-q)}$ para alguns valores de $q \geq 1$. Estas funções são intimamente associadas à entropia S_q , do mesmo modo que Gaussianas e exponenciais o são com S_{BG} . No Cap. 4 mostraremos que a distribuição de velocidades de um sistema Hamiltoniana com interação de longo alcance pode ser muito bem descrita por uma q -gaussiana com q da ordem de $q = 1.5$; já no Cap. 6, veremos que a q -exponencial com q da ordem de $q = 1.2$ é capaz de reproduzir a distribuição de momento transversal de partículas produzidas no LHC.

Escolhendo $\mathcal{A}(p, q) = p_i^2/2$ e integrando sobre as demais coordenadas, obtemos a generalização da Maxwelliana, *i.e.*, a distribuição q -gaussiana:

$$P(p) = P_0 e_q^{-\beta_q p^2/2} = A_q [1 - (1 - q)\beta_q p^2/2]^{1/(1-q)} \quad (1.14)$$

A q -gaussiana é normalizável para $q < 3$, e a constante de normalização A_q depende se q é maior ou menor[¶] do que $q = 1$. No limite $q \rightarrow 1$, a q -exponencial recai na exponencial usual, $\beta_1 = \beta$, $A_1 = \sqrt{\beta/2\pi}$ e a Gaussiana (1.10) é recuperada. A Fig. 1.1 exhibe o comportamento das funções q -gaussiana e q -exponencial para alguns valores de $q \geq 1$.

A escolha $\mathcal{A}(p, q) = p_i^2/2$ que resultou nas distribuições (1.10) e (1.14) visa exibir a relação íntima entre S_q e as funções q -gaussiana e q -exponencial, da mesma maneira que S_{BG} se relaciona com exponenciais e Gaussianas. Na otimização de S_{BG} essa escolha não é necessária. Uma Hamiltoniana puramente cinética por exemplo, *i.e.*, $\mathcal{H}(p, q) = \sum p_i^2/2$, resultaria igualmente na Maxwelliana. Com S_q esse resultado não se repete porque a q -exponencial não se fatora: $e_q^{a+b} \neq e_q^a e_q^b$. O vínculo (1.12) pode soar artificial, a análise de um exemplo específico talvez ajude a torná-lo mais intuitivo. Escolher $\mathcal{A} = p_i^2/2$ significa fixar uma largura σ^2 na Eq. (1.7) tal que $\sigma^2 = \langle p^2 \rangle = 1/\beta$. Entretanto, quando a distribuição é uma q -gaussiana, o segundo momento diverge quando $q \geq 5/3$. O segundo q -momento calculado de acordo com a Eq. (1.12) por outro lado fornece $\sigma_q^2 = \langle p^2 \rangle_q = [2/\beta_q]/[3 - q]$. Peguemos $q = 2$. Neste caso, a q -gaussiana (1.14) é a Lorentziana $A_2/[1 + \beta_2 p^2/2]$, que tem segundo momento divergente mas segundo $q = 2$ -momento igual a $\sigma_2^2 = \langle p^2 \rangle_2 = 2/\beta_2$, cuja raiz é a metade da largura plena à meia altura (FWHM), quantidade normalmente usada para caracterizar a largura da Lorentziana. Adotar o vínculo (1.12) significa, então, fixar a largura adequada à distribuição. É importante destacar que q -exponenciais e q -gaussianas, análogas às Eqs. (1.13) e (1.14), são obtidas mesmo com o vínculo tradicional (1.7) usado na otimização de S_{BG} — são

[¶]No intervalo $1 < q < 3$, temos: $A_q = \sqrt{\frac{\beta_q}{2\pi}} \sqrt{q-1} \left[\Gamma\left(\frac{3-q}{2(1-q)}\right) \right]^{-1} \Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)$. Quando, *e.g.*, $q = 2$, $A_2 = \sqrt{2\beta_2}/2\pi$.

funções ligadas a S_q e não ao vínculo adotado. Contudo, como esse exemplo da largura ilustra, há vantagens em empregar a Eq. (1.12) [ver Sec. 3.6 de [10] e particularmente os trabalhos [27, 28]]. O nosso interesse maior é justamente essa ligação entre S_q e a distribuição q -gaussiana. Assim como a Maxwelliana [o peso de Boltzmann (1.9) de forma mais ampla] é a assinatura de que um sistema clássico em equilíbrio térmico é descrito pela termoestatística de Boltzmann-Gibbs, esperamos que a observação de q -gaussianas seja indício da necessidade de uma termoestatística generalizada. E assim como a Gaussiana surge por inúmeras vias mais ou menos relacionadas [*e.g.*, CLT, equação de Fokker-Planck linear, procedimento heurístico original de Maxwell], a q -gaussiana também pode ser deduzida de outros meios e não apenas do princípio de máxima entropia [*e.g.*, generalização q -CLT, Fokker-Planck não linear [10, 29], generalização do procedimento de Maxwell [30, 31]]. Desnecessário mencionar que q -gaussianas, e também q -exponenciais, são observadas em diversos sistemas [ver [10], vários capítulos, e os *reviews* [32, 33] para resultados recentes]. Aqui, no Cap. 4, mostraremos que a distribuição de velocidades de um sistema Hamiltoniano clássico com interação de longo alcance é muito bem descrita por uma q -gaussiana, e, no Cap. 6, que a q -exponencial pode ter papel importante na análise da distribuição de momento transversal de partículas produzidas em colisões relativísticas no LHC.

1.2 Entropia S_δ

O título do presente trabalho menciona *entropias não aditivas*, no plural. A mecânica estatística não extensiva baseada em S_q visa sistemas cujas configurações microscópicas escalem como $W \sim N^\rho$, com $\rho > 0$. Tsallis comentou brevemente em seu livro [10] sobre a seguinte alternativa a S_q :

$$S_\delta = k_B \sum_{i=1}^W p_i \left[\ln \frac{1}{p_i} \right]^\delta = k_B [\ln W]^\delta \quad (1.15)$$

δ é um parâmetro real positivo. O extremo desse funcional também ocorre quando os microestados são equiprováveis [igualdade mais à direita] e é imediato verificar que para $\delta \rightarrow 1$, S_{BG} é recuperado. A entropia S_δ é adequada em sistemas correlacionados tais que o número de microestados escale com N na forma $W \sim \nu^{N^\gamma}$, com $\nu > 1$ e $0 < \gamma < 1$, quer dizer, visa uma classe de correlação intermediária no sentido que $N^\rho \ll \nu^{N^\gamma} \ll \mu^N$ para N grande. Em sistemas assim, tanto S_{BG} quanto S_q são não extensivas, mas para o valor específico $\delta = 1/\gamma$, obtemos, na equiprobabilidade, $S_\delta \propto N$.

Afora o breve comentário inicial que o definiu e o motivou, o funcional entrópico (1.15) não foi explorado em mais detalhes naquela ocasião. Isso veio a ocorrer mais recentemente [2], quando foi percebido em S_δ um candidato para caracterizar a entropia de buracos negros, como será discutido no Cap. 6, a partir da Pág. 84.

Capítulo 2

Modelos Inerciais de Spins Clássicos

Neste capítulo definiremos o modelo geral de interesse neste trabalho e discutiremos sua solução canônica de equilíbrio. Dois casos particulares do modelo serão analisados por meio de simulações em capítulos subsequentes.

2.1 Introdução

Modelos de spins clássicos são de interesse em física há bastante tempo, particularmente de pesquisadores ligados às comunidades de mecânica estatística e magnetismo. Inúmeras técnicas, analíticas e numéricas, foram desenvolvidas ao longo dos anos para tratar destes sistemas, de modo que um conjunto sólido de conhecimentos capaz de descrever suas propriedades termodinâmicas e críticas foi adquirido. Dentre os modelos de spins clássicos, encontra-se o n -vetorial, que contém como casos particulares o modelo XY [$n=2$] e o de Heisenberg [$n=3$], cujas generalizações serão o foco deste trabalho.

O Hamiltoniano do modelo n -vetorial não contém o termo cinético, dizemos se tratar de um sistema *não inercial*. A investigação numérica se dá então por meio de técnicas estocásticas, como Monte Carlo por exemplo. A interação entre spins nesse modelo é somente entre primeiros vizinhos, em outras palavras, é uma interação de *curto alcance*, não à toa a abordagem via mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs ter sempre se mostrado frutífera. As variações ou generalizações do modelo n -vetorial analisadas aqui consistem na adição do termo cinético ao Hamiltoniano, tornando-o *inercial*, e na modificação da interação entre os spins com a finalidade de controlar o seu alcance. A adição do termo cinético permite derivar equações de movimento, e, utilizando apenas as Leis de Newton, a Dinâmica Molecular surge como ferramenta natural para a investigação numérica do sistema. Uma dessas generalizações, ligada ao modelo $n=2$ -vetorial, é o α -XY, que engloba o atualmente bastante conhecido e estudado modelo HMF [*Hamiltonian Mean Field*]; a outra, ligada ao modelo $n=3$ -vetorial, chamaremos de α -Heisenberg. As simulações nos capítulos subsequentes desses dois sistemas serão realizadas em dimensão $d=1$, mas manteremos a discussão mais geral sempre que possível.

2.2 Sobre o Alcance da Interação

Definiremos aqui o modelo n -vetorial e a modificação relativa ao alcance da interação entre os spins, tema de extrema relevância neste trabalho.

Consideremos um conjunto de N spins \mathbf{S}_i clássicos de n componentes [vetores] arranjados numa rede hipercúbica d -dimensional regido pelo seguinte Hamiltoniano:

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (2.1)$$

$J > 0$ é a constante de acoplamento [ferromagnética]. O símbolo $\langle i, j \rangle$ indica que a soma cobre apenas o vizinho mais próximo de cada spin: se o sistema é arranjado em um anel, ou seja, um sistema unidimensional, cada spin terá apenas dois vizinhos mais próximos; caso seja arranjado em um plano formando uma rede quadrada, cada spin terá quatro vizinhos mais próximos; assim em diante. Estamos diante de um exemplo típico de sistema cuja interação é de *curto alcance*. Dependendo da dimensionalidade n do vetor \mathbf{S}_i , o Hamiltoniano (2.1) pode representar o modelo de Ising de spin 1/2 [$n=1$], o modelo XY clássico, também chamado de modelo planar [$n=2$], ou o modelo clássico de Heisenberg [$n=3$], todos bem entendidos e descritos pela mecânica estatística tradicional. A Eq. (2.1) define o modelo n -vetorial, cujas propriedades termodinâmicas para o caso unidimensional foram derivadas por Stanley para qualquer $n > 0$ em 1969 [34].

Consideremos agora o caso no qual a interação entre os spins não está restrita apenas ao vizinho mais próximo. Vamos ao extremo oposto, situação em que o sistema encontra-se globalmente acoplado, com todos os spins interagindo uns com os outros com a mesma intensidade independentemente da distância. O Hamiltoniano neste caso se escreve:

$$H = -J \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j>i}^N \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (2.2)$$

Aqui temos um exemplo de sistema cuja interação é de *longo alcance*, infinita de fato. Os passos seguidos por Stanley em seu trabalho de 1969 não podem ser repetidos para este Hamiltoniano. Podemos intuitivamente enxergar que a energia total de um sistema regido pela Eq. (2.2) não é proporcional a seu tamanho N , o Hamiltoniano portanto é não extensivo e as ferramentas da mecânica estatística tradicional tornam-se limitadas. Especificamente, grandezas termodinâmicas deriváveis por meio da função de partição divergem no limite $N \rightarrow \infty$, e nenhuma quantidade diferente de zero ou infinito pode, em princípio, ser calculada.

Uma maneira de transpor esta dificuldade e conciliar o Hamiltoniano (2.2) com o formalismo da mecânica estatística tradicional existe. Se a constante de acoplamento for convenientemente reescalada como $J \rightarrow J/N$, procedimento conhecido como prescrição de Kac, a extensividade do sistema é recuperada. Após este reescalamto, a Eq. (2.2) passa a ser lida como:

$$H = -\frac{J}{2N} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (2.3)$$

Feito. Aplicando a prescrição de Kac, todas as técnicas da termoestatística convencional tornam-se disponíveis. Este procedimento é evidentemente legal do ponto de vista matemático, contudo ele nos lança em uma situação um tanto incomum em que a constante de acoplamento microscópica, entre

pares de spins, depende do tamanho N do sistema. Baxter, na Pág. 39 de seu livro de 1982 [35], registra sua impressão sobre este fato de forma contundente, classificando-o como “*unphysical*”; porém é pragmático ao emendar: “*Nevertheless, it does give moderately sensible thermodynamic properties*”. Realmente, os resultados derivados do Hamiltoniano (2.3) emulam os do (2.1) ao aplicarmos a aproximação de campo médio. Definir se um modelo é físico ou não é muitas vezes uma questão [epistemológica] delicada, e que pode ter grande componente de perspectiva pessoal, basta lembrarmos que a quantização da energia foi encarada como não física durante muito tempo [36]. Baxter mesmo, mais à frente em seu livro, comenta que o inicialmente “*unphysical*” modelo esférico de Berlin & Kac tornara-se fisicamente aceitável após Stanley, “*fortunately*”, mostrar [34] que ele poderia ser interpretado como um caso limite do modelo n -vetorial (2.1), $n \rightarrow \infty$ no caso. Aqui, com a mesma finalidade, utilizaremos uma versão adequadamente generalizada da prescrição de Kac, mas sem perder de vista que este tipo de procedimento levanta discussões relevantes desde há muitos anos. Cabe também mencionar o debate em torno da Ref. [37] a respeito do conteúdo físico da mecânica estatística não extensiva.

O próximo Hamiltoniano é capaz de abarcar tanto o modelo n -vetorial (2.1) quanto o modelo globalmente acoplado (2.3):

$$H = -\frac{J}{2\tilde{N}} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{r_{ij}^\alpha} \quad (2.4)$$

O parâmetro α é um número real positivo ou nulo, e \tilde{N} cumpre o mesmo objetivo de N na Eq. (2.3): tornar o sistema extensivo; veremos adiante que esta propriedade é alcançada se \tilde{N} for uma função $\tilde{N} = \tilde{N}(\alpha, d, N)$. Por agora[¶], é suficiente mencionar que $\tilde{N} \approx N$ para $\alpha = 0$ e que $\tilde{N} = 2d \sim \mathcal{O}(1)$ para $\alpha \rightarrow \infty$. $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ mede a distância [adimensional] entre os spins na rede, logo o parâmetro α é responsável por regular o alcance da interação. O menor valor de r_{ij} é a unidade, que ocorre ao considerarmos spins vizinhos: $r_{i,i+1} = 1 \forall i$. Esta última propriedade garante que o Hamiltoniano (2.4) recupere o (2.1) no limite $\alpha \rightarrow \infty$, e recupere o (2.3) quando $\alpha = 0$, uma vez que $r_{ij}^0 = 1 \forall i, j$. Na rede, levando-se em conta condições periódicas de contorno [nosso interesse], a distância entre spins considerada será a menor. Por exemplo, para dimensão $d=1$, o sistema estará arranjado num anel e teremos $r_{ij} = 1, 2, 3, \dots, N/2$. Com uma pequena modificação, a Eq. (2.4) será o modelo de interesse neste trabalho. Após a introdução do termo cinético K , ela representará a energia potencial V de interação do sistema, agora visualizado como um conjunto de rotores clássicos localizados, como exposto na próxima seção.

2.3 Sistemas de Spins Inerciais

Na seção anterior, partimos do modelo n -vetorial tradicional e chegamos ao modelo de alcance controlável (2.4). Uma pequena modificação nesta equação, capaz de deslocar o mínimo da energia a zero[‡], e a adição do termo cinético K , resulta no sistema geral de interesse neste trabalho: N rotores interagentes clássicos, arranjados numa rede d -dimensional, cuja função Hamiltoniana é

[¶]No próximo capítulo discutiremos em detalhes o parâmetro \tilde{N} , que está definido na Eq. (3.1), Pág. 18.

[‡]Deslocar o mínimo da energia potencial a zero associa, neste caso, energia interna termodinâmica nula a temperatura nula.

dada por:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i^2 + \frac{J}{2\tilde{N}} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1 - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{r_{ij}^\alpha} = K + V \quad (\alpha \geq 0) \quad (2.5)$$

Cada rotor fixo na posição \mathbf{r}_i da rede é representado pelo vetor \mathbf{S}_i de $n > 1$ componentes, cuja direção pode variar continuamente dentro de uma esfera n -dimensional assumida de raio unitário: $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_i = S_i^2 = 1 \forall i$. Essa esfera será um círculo se $n = 2$ [rotores XY, modelo α -XY] ou uma esfera convencional se $n = 3$ [rotores de Heisenberg, modelo α -Heisenberg], os dois casos particulares analisados numericamente nos próximos capítulos. O vetor \mathbf{p}_i representa o momento [angular] do respectivo rotor, que é equivalente à velocidade [angular], uma vez que estamos considerando massa [momento de inércia] unitária. Tirando proveito do vínculo $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_i = 1$, podemos expressar a orientação do vetor \mathbf{S}_i usando $n-1$ ângulos e reescrever a Eq. (2.5) em função de variáveis de momento e posição canonicamente conjugadas. Isso deixa explícito o caráter de sistema Hamiltoniano do modelo, com equações de movimento deriváveis a partir das Equações de Hamilton, o que o torna de interesse bastante amplo em Física.

2.3.1 Solução Canônica

Trabalhando no ensemble canônico, a adição da energia cinética K não trás maiores dificuldades no cálculo das propriedades de equilíbrio do sistema (2.5). Efetivamente, escrevendo a função de partição Z como o produto $Z = Z_K Z_V$, a contribuição do termo cinético se escreve[¶]:

$$Z_K = \int d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_N e^{-\beta K} = \left[\frac{2\pi}{\beta} \right]^{\frac{N(n-1)}{2}} \quad (2.6)$$

A constante de Boltzmann será tomada $k_B = 1$ no decorrer da tese, logo $\beta = 1/T$.

A solução da contribuição configuracional Z_V é bem menos imediata, e não existe uma resposta geral para valores arbitrários de α , d e n . Para facilitar a análise deste termo, é útil avaliar separadamente os dois extremos da Eq. (2.5): o globalmente acoplado [$\alpha = 0$] e aquele em que apenas spins vizinhos interagem [$\alpha \rightarrow \infty$]. Denotando o potencial por $V(\alpha)$, vem:

$$V(0) = \frac{J}{2\tilde{N}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [1 - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j] \quad (2.7)$$

A restrição $j \neq i$ não é mais necessária, pois $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_i = 1 \forall i$, e a [pequena] diferença de \tilde{N} em relação a N foi incorporada na constante de acoplamento J [de fato, $\tilde{N} = N - 1$ aqui]^{¶¶}. Um pouco de reflexão nos fornece o outro extremo:

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} V(\alpha) = \frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} [1 - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j] \quad (2.8)$$

[¶]Por efeito do vínculo $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_i = 1$, o número de graus de liberdade de cada rotor do sistema (2.5) é $(n-1)$, como ficará claro nos próximos capítulos.

^{¶¶}Um potencial de interação com esta estrutura confere ao modelo com $\alpha = 0$ vantagem computacional extremamente relevante. Como as somas em i e em j são independentes, a ordem efetiva do algoritmo é $\mathcal{O}(N)$, e não $\mathcal{O}(N^2)$ como ocorre para os demais valores de $\alpha > 0$.

Avaliemos inicialmente o extremo $\alpha = 0$. A parte configuracional da função de partição para o potencial globalmente acoplado (2.7) se escreve:

$$Z_V = \int d\Omega_1 \dots d\Omega_N e^{-\beta V(0)} = \frac{e^{-\frac{\beta J N}{2}}}{\pi^{n/2}} \int d\Omega_1 \dots d\Omega_N \int_{\mathbb{R}^n} d^n y \exp \left[-|\mathbf{y}|^2 + \sqrt{\frac{2\beta J}{N}} \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{y} \right]$$

$d\Omega_i$ representa o elemento de superfície da n -esfera de raio unitário [$n > 1$], e o termo mais à direita advém da transformação de Hubbard-Stratonovich. Uma mudança de variáveis e a integração sobre a parte angular permitem reescrever o último resultado como:

$$Z_V = c_1 [c_2 \Omega_{n-1}]^N e^{-\frac{\beta J N}{2}} \left[\frac{N}{\beta J} \right]^{n/2} \int_0^\infty dy \exp \left\{ N \left[-\frac{y^2}{2\beta J} + \ln \left(\frac{I_{n/2-1}(y)}{y^{n/2-1}} \right) \right] \right\}$$

Esta equação está num formato apropriado para usarmos o método *steepest descent*, também chamado de ponto de sela; nela $I_n(x)$ representa a função modificada de Bessel de primeira espécie, Ω_{n-1} é a área de uma $(n-1)$ -esfera, e c_1 e c_2 são quantidades que dependem apenas de n . Juntando a contribuição cinética (2.6) e denotando por y_0 o valor que captura o máximo do integrando, a energia livre [por partícula] fica[¶]:

$$\beta F = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z = \frac{\beta J}{2} - \frac{n-1}{2} \ln \left[\frac{2\pi}{\beta} \right] + \left[\frac{y_0^2}{2\beta J} - \ln \left(\frac{I_{n/2-1}(y_0)}{y_0^{n/2-1}} \right) \right] + \ln [c_2 \Omega_{n-1}] \quad (2.9)$$

A condição de máximo fornece a relação auto consistente:

$$\frac{y_0}{\beta J} - \frac{I_{n/2}(y_0)}{I_{n/2-1}(y_0)} = 0$$

A relação acima está intimamente associada com a magnetização [espontânea], de fato $M = y_0/\beta J$, resultado que pode ser deduzido repetindo-se os passos anteriores porém adicionando um termo de campo externo [com a forma $\mathbf{h} \cdot \sum \mathbf{S}_i$] ao potencial (2.7). Deste procedimento resulta, a campo nulo, o valor finito $M = \langle |\mathbf{M}| \rangle = y_0/\beta J$ para temperaturas abaixo da crítica, sendo \mathbf{M} o vetor magnetização, vetor de n componentes calculado microscopicamente via:

$$\mathbf{M} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i$$

Identificando a magnetização, a energia interna [por partícula] se escreve:

$$M = \frac{I_{n/2}(\beta J M)}{I_{n/2-1}(\beta J M)} \Rightarrow U = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{N} = \frac{\partial(\beta F)}{\partial \beta} = \frac{n-1}{2\beta} + \frac{J}{2} [1 - M^2] \quad (2.10)$$

Considerando M pequeno e expandindo as funções de Bessel na equação anterior, obtemos a tem-

[¶]Sem a prescrição de Kac $J \rightarrow J/N$, ou o escalamento de Tsallis $J \rightarrow J/\tilde{N}$ se $0 < \alpha \leq d$ discutido no próximo capítulo, esse limite diverge.

peratura crítica T_c e a respectiva energia crítica U_c :

$$M - \frac{I_{n/2}(\beta JM)}{I_{n/2-1}(\beta JM)} \approx \left[1 - \frac{\beta J}{n}\right] M \Rightarrow T_c = \frac{J}{n} \Rightarrow U_c = J \left[1 - \frac{1}{2n}\right] \quad (2.11)$$

A solução (2.10) associada ao potencial globalmente acoplado (2.7), para n qualquer como esboçada aqui, foi obtida por Nobre & Tsallis na Ref. [38]. De forma independente e quase simultânea[¶], Campa, Giansanti & Moroni, em um trabalho longo e intrincado [39], mostraram que por meio de uma escolha apropriada de \tilde{N} e da imposição de condições periódicas de contorno, a mesma solução se aplica também à Hamiltoniana (2.5) no intervalo $\alpha < d$. A extensão da solução do caso particular $\alpha = 0$, no qual os rotores estão acoplados com a mesma intensidade e a estrutura da rede subjacente perde importância, ao sistema (2.5), mesmo sob a condição $\alpha < d$, é um resultado bastante geral, notadamente quando levamos em consideração que no caso de spins interagindo apenas entre vizinhos não há solução para qualquer n em dimensão $d > 1$.

Vamos avaliar agora o extremo associado ao potencial (2.8), correspondente a $\alpha \rightarrow \infty$. Não existe solução geral para qualquer n e d neste caso. Entretanto, considerando uma cadeia de spins linear, *i.e.*, com $d=1$, é possível derivar uma expressão fechada para n qualquer análoga à anterior. Como nossas simulações serão somente com cadeias lineares, restringiremos a análise a $d=1$. A parte configuracional da função de partição para o potencial de primeiros vizinhos (2.8) é dada então por:

$$Z_V = \int d\Omega_1 \dots d\Omega_N e^{-\beta V(\infty)} = e^{-\frac{\beta J N}{2}} \int d\Omega_1 \dots d\Omega_N \exp \left[+\frac{\beta J}{2} \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \right]$$

Aproveitando o resultado deduzido por Stanley [34], válido para sistemas unidimensionais sujeitos a condições de contorno tanto periódicas quanto de bordas livres, a equação anterior se escreve [novamente c_1 e c_2 dependem apenas de n]:

$$Z_V = c_1 [c_2 \Omega_{n-1}]^N e^{-\frac{\beta J N}{2}} \left[\frac{I_{n/2-1}(\beta J/2)}{(\beta J/2)^{n/2-1}} \right]^N \quad (d=1)$$

Juntando a contribuição cinética (2.6), chegamos à energia interna:

$$U = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = \frac{n-1}{2\beta} + \frac{J}{2} \left[1 - \frac{I_{n/2}(\beta J/2)}{I_{n/2-1}(\beta J/2)} \right] \quad (d=1) \quad (2.12)$$

Esta solução corresponde a um sistema unidimensional de spins clássicos interagindo apenas entre vizinhos mais próximos; não há, portanto, estado ordenado [espontâneo] a temperatura finita: a magnetização vale $M=0$ sempre que $T > 0$.

Podemos então agrupar os resultados correspondentes a $0 \leq \alpha < d$ e a $\alpha \rightarrow \infty$, Eqs. (2.10) e (2.12) respectivamente, e escrever a energia interna do modelo definido pela função Hamiltoniana (2.5)

[¶]Artigos recebidos pelas revistas com menos de 2 semanas de diferença, 24 Janeiro [38] e 5 Fevereiro [39] de 2003.

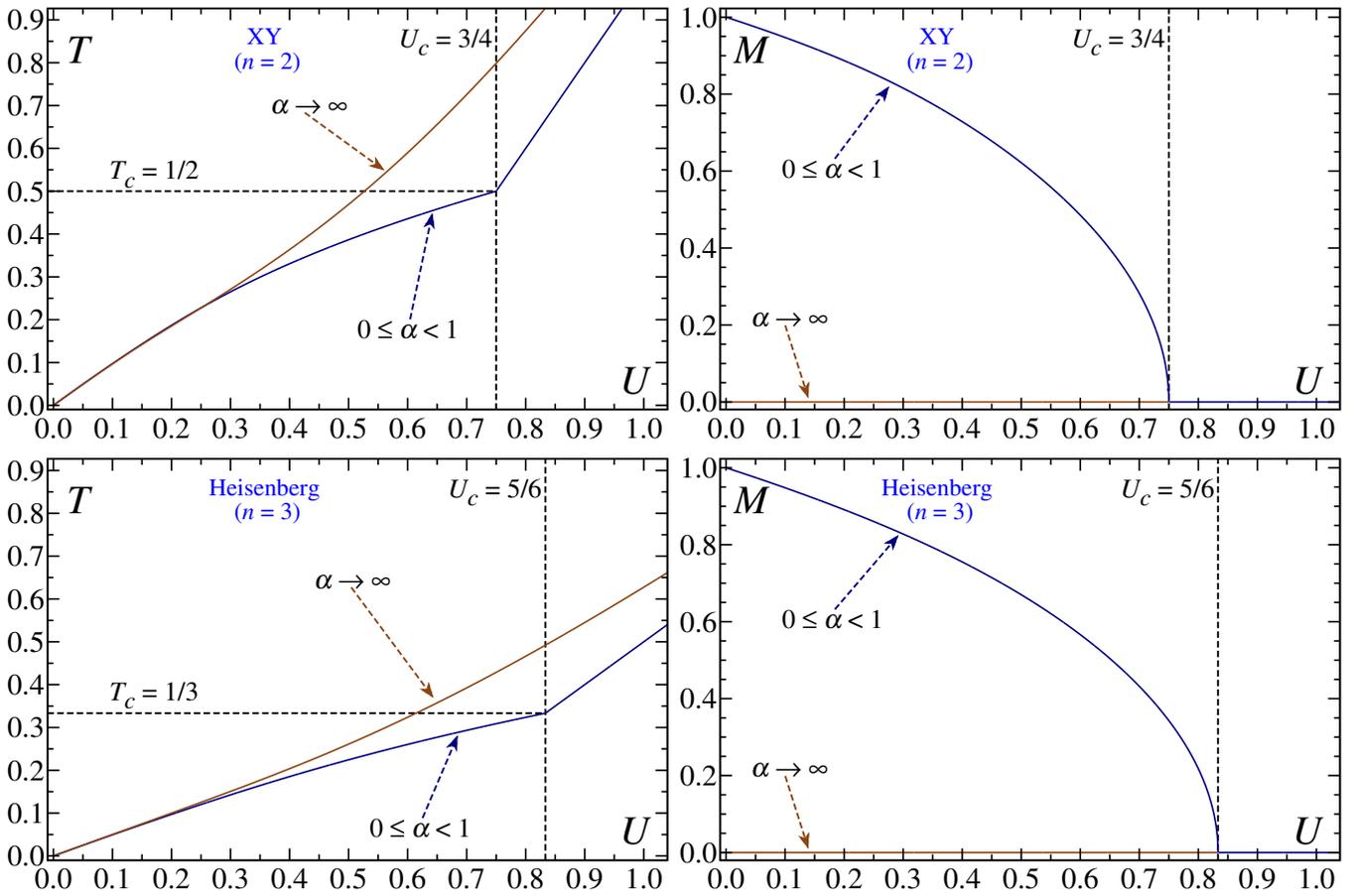


Fig. 2.1: Solução analítica do modelo inercial de spins clássicos (2.5) para dimensão $d=1$ e dois valores particulares de n : $n=2$ [rotores XY, acima] e $n=3$ [rotores de Heisenberg, abaixo]. As figuras apresentam a temperatura T [esquerda] e a magnetização M [direita] contra a energia interna U para $0 \leq \alpha < 1$ e $\alpha \rightarrow \infty$, conforme Eqs. (2.13) e (2.14) com constante de acoplamento $J=1$. Na região $0 \leq \alpha < 1$, o sistema exibe uma transição de fase de segunda ordem no ponto crítico $(T_c, U_c) = (1/2, 3/4)$ se $n=2$, ou no ponto crítico $(1/3, 5/6)$ se $n=3$ [indicados com as linhas tracejadas], que separam as fases ferromagnética [$U < U_c$] e paramagnética [$U > U_c$]. Para $\alpha \rightarrow \infty$, não há transição a temperatura finita e apenas a fase desordenada com $M=0$ existe. Na região $1 \leq \alpha < \infty$ não há solução analítica de nosso conhecimento. Os valores $n=2$ e $n=3$ correspondem aos casos analisados numericamente nos próximos capítulos.

sob condições periódicas de contorno como:

$$U(M, \beta) = \begin{cases} \frac{n-1}{2\beta} + \frac{J}{2} [1 - M^2] & \text{para } 0 \leq \alpha < d \\ \frac{n-1}{2\beta} + \frac{J}{2} \left[1 - \frac{I_{n/2}(\beta J/2)}{I_{n/2-1}(\beta J/2)} \right] & \text{para } \alpha \rightarrow \infty \text{ e } d=1 \end{cases} \quad (2.13)$$

e a magnetização como:

$$M(\beta) = \begin{cases} M = \frac{I_{n/2}(\beta JM)}{I_{n/2-1}(\beta JM)} & \text{para } 0 \leq \alpha < d \\ M = 0 & \text{para } \alpha \rightarrow \infty \text{ e } d=1 \end{cases} \quad (2.14)$$

Sendo os valores críticos T_c e U_c associados à solução na região $0 \leq \alpha < d$ dados na Eq. (2.11).

A soluções (2.13) e (2.14) para os valores particulares $n=2$ e $n=3$ estão representadas na Fig. 2.1.

Nela, podemos observar a transição de fase contínua separando os estados ferromagnético e paramagnético que ocorre quando o parâmetro α pertence ao intervalo $0 \leq \alpha < d$. À temperatura suficientemente alta — ou, de forma equivalente, à energia suficientemente alta —, a direção dos spins $\{\mathbf{S}_i\}$ é aleatória, correspondendo à fase paramagnética desordenada, com parâmetro de ordem $M = 0$. No estado fundamental, todos os spins estão orientados paralelamente, correspondendo ao estado ferromagnético completamente ordenado com $M = 1$. Entre esses dois regimes, uma transição de fase contínua ocorre na temperatura crítica $T_c = J/n$ associada à energia crítica $U_c = J[1 - 1/2n]$. Para $\alpha \rightarrow \infty$ [e $d = 1$], não há transição a temperatura finita e apenas a fase desordenada com magnetização $M = 0$ existe.

Durante este capítulo, mantivemos a discussão sobre os modelos de spins clássicos fazendo referência a pouquíssimos trabalhos. De forma geral, cada modificação em um desses modelos tem sua própria história, envolveu motivações e dificuldades particulares e contou com a contribuição de inúmeros autores ao longo dos anos. De Ising [$d = 1$] a Onsager [$d = 2$] por exemplo, foram necessárias quase duas décadas de muitos esforços [40]. Trabalhos específicos relacionados ao sistema (2.5) para $n = 2$ e $n = 3$ serão mencionados respectivamente nos Caps. 4 e 5, quando esses dois casos particulares forem analisados.

Capítulo 3

Escalamento de Sistemas Não Extensivos

Neste capítulo trataremos da quantidade \tilde{N} , responsável por tornar o sistema extensivo para qualquer valor de α e permitir a derivação das relações termodinâmicas no capítulo anterior.

3.1 Introdução

O potencial de interação na Eq. (2.5) é de longo alcance quando $0 \leq \alpha \leq d$. Longo alcance no sentido que, caso o fator de escala \tilde{N} seja da ordem $\tilde{N} \sim \mathcal{O}(1)$, a energia interna U diverge no limite $N \rightarrow \infty$. Lidamos então com um sistema não extensivo, cuja energia total $\langle \mathcal{H} \rangle$ cresce com dependência de N mais que linear e o limite termodinâmico não é bem definido, impedindo, em princípio, a derivação de propriedades termodinâmicas de equilíbrio por meios microscópicos. Esse comportamento se verifica porque, no intervalo $0 \leq \alpha \leq d$, um potencial entre partículas da forma $1/r^\alpha$ não cai suficientemente rápido conforme a distância r aumenta, embora esta não seja uma condição sempre suficiente e possa haver dependência do sistema físico em análise. Por exemplo, um potencial proporcional a $1/r^\alpha$ engloba dois casos de destacada importância: gravitação Newtoniana e interação Coulombiana, para os quais $\Phi(r) \propto 1/r$ num sistema tridimensional [$\alpha = 1 < d = 3$, longo alcance portanto]. A blindagem eletrostática contudo, torna a interação Coulombiana efetivamente de curto alcance [da ordem do raio de Debye], garantindo a existência do limite termodinâmico [41]. Tal efeito não é compartilhado pela gravitação, a qual, num sentido estrito, permanece um problema em aberto; deve-se registrar porém os avanços no seu entendimento obtidos com as ferramentas da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs [42, 43]. No que diz respeito especificamente aos modelos de spins do Cap. 2, é interessante observar que algumas vezes a discussão da região de longo alcance era simplesmente abandonada, porque, para $\alpha < d$, a energia não é extensiva e, conseqüentemente, as propriedades do modelo serão *non-thermodynamic*, como escreveram Hiley & Joyce [44]; logo, os autores continuam, ele não será discutido *further*.

3.2 Escalamento de Tsallis

A fim de calcular o limite termodinâmico na região de longo alcance, a quantidade \tilde{N} deve ser um fator de escala que assegure uma energia total proporcional ao tamanho do sistema N . Para $\alpha = 0$, esta proporcionalidade é alcançada com a prescrição de Kac, $\tilde{N} = N$. Para valores arbitrários de α entre $0 \leq \alpha/d \leq \infty$, a extensividade termodinâmica de um sistema regido pela função

Hamiltoniana (2.5) é garantida com a seguinte escolha para $\tilde{N} = \tilde{N}(\alpha, d, N)$:

$$\tilde{N} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1}{r_{ij}^\alpha} \quad (3.1)$$

No limite $\alpha \rightarrow \infty$, segue que $\tilde{N} = 2d$ [número de primeiros vizinhos da rede hipercúbica d -dimensional]. Para $\alpha/d < \infty$ e N grande, o comportamento é $\tilde{N} \sim N^{1-\alpha/d}$ quando $0 \leq \alpha/d < 1$ [logo, $\tilde{N} \sim N$ se $\alpha = 0$], $\tilde{N} \sim \ln N$ quando $\alpha/d = 1$ ou $\tilde{N} \sim 1/(\alpha/d - 1) \sim \mathcal{O}(1)$ quando $\alpha/d > 1$; portanto, definindo \tilde{N} de acordo com expressão (3.1) acima, o potencial de interação na Eq. (2.5) torna-se proporcional ao tamanho do sistema N em todo o intervalo $0 \leq \alpha/d \leq \infty$, em outras palavras, o modelo torna-se formalmente extensivo para qualquer valor de α/d . O preço a pagar é uma constante microscópica de acoplamento dependente, através de \tilde{N} , do tamanho do sistema, ou, como será discutido mais à frente, uma reformulação da estrutura da termodinâmica, uma opção mais abrangente e talvez de preço mais módico. Relativamente aos modelos de spins interagentes clássicos analisados aqui, a Eq. (3.1) é o final da história. Conforme demonstrado na Ref. [39], ela confere à Hamiltoniana (2.5) não apenas a extensividade na região $0 \leq \alpha < d$, mas também as mesmas propriedades termodinâmicas do caso particular $\alpha = 0$. Para referência futura, notemos que a invariância translacional [obtida imaginando um sistema infinitamente grande ou por meio de condições periódicas de contorno] permite reescrever a Eq. (3.1) como:

$$\tilde{N} = \sum_{j \neq i}^N \frac{1}{r_{ij}^\alpha} \quad \text{para} \quad i = 1, 2, \dots, N$$

A necessidade de escalar a interação com um fator $\tilde{N} = \tilde{N}(\alpha, d, N)$ em sistemas de longo alcance cujo potencial de pares decai como uma lei de potência $1/r^\alpha$, foi percebida no trabalho de Jund, Kim & Tsallis de 1995 [45] que versa sobre ferrofluidos [detalhes abaixo]. Logo em seguida, Cannas & Tamarit [46] aplicaram o mesmo conceito ao estudarem uma generalização de alcance controlável do modelo de Curie-Weiss. Especificamente, os autores da Ref. [46] analisaram um sistema regido pela Eq. (2.4) para o caso particular $n = 1$:

$$H = -\frac{J}{2\tilde{N}} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{S_i S_j}{r_{ij}^\alpha} \quad \text{com:} \quad S_i = \pm 1 \quad \forall i$$

Neste trabalho, foi numericamente verificado que um escalamento com o comportamento da Eq. (3.1) deixava a equação de estado termodinâmica $M = M(T)$ independente do parâmetro α no regime não extensivo [no intervalo $0 \leq \alpha \leq d$]. Resultados similares foram exibidos de forma extremamente clara na Ref. [47] e aplicações da mesma ideia em sistemas com interação do tipo Lennard-Jones também foram realizadas [48, 49].

Além dos trabalhos supracitados, a validade do escalamento introduzido como conjectura em [45] foi confirmada em diversas outras ocasiões [10]. Uma análise sistemática contudo, foi empreendida utilizando o modelo α -XY, definido como o caso particular $n = 2$ da Hamiltoniana (2.5), no qual os vetores unitários \mathbf{S}_i são vistos como rotores clássicos bidimensionais. Após ser proposto na Ref. [50],

Tamarit & Anteneodo [51] verificaram numericamente que a prescrição definida pela Eq. (3.1) confere ao modelo α -XY na região de longo alcance $0 < \alpha < d$ o mesmo comportamento termodinâmico do caso $\alpha = 0$, que fora derivado por Antoni & Ruffo [52]. Esta equivalência foi logo demonstrada analiticamente por Campa, Giansanti & Moroni especificamente para $n = 2$ [53], e mais tarde estendida pelos mesmos autores para n qualquer [39], como comentado. Esta universalidade termodinâmica para o modelo α -XY no intervalo $0 \leq \alpha < d$ foi numericamente exibida, por exemplo, nos trabalhos [3, 51, 53, 54], e será apresentada no Cap. 4; já para o modelo α -Heisenberg [$n = 3$], foi verificada mais recentemente na Ref. [4], como será discutido no Cap. 5.

A motivação para um escalamento \tilde{N} com comportamento da Eq. (3.1) surgiu da investigação de uma suspensão coloidal de partículas magnéticas, modelo para descrever ferrofluidos, o que levou os autores da Ref. [45] a analisar essencialmente o seguinte potencial de pares [σ e ε são parâmetros positivos]:

$$\Phi(r_{ij}) = \varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^\rho - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^\lambda \right] \quad (0 \leq \lambda \leq \rho \leq \infty) \quad (3.2)$$

Entretanto, a mesma conclusão pode ser enxergada avaliando um caso mais simples, relacionado ao termo atrativo da equação anterior. Suponha que a energia potencial de pares seja do tipo gravitacional em $d = 3$ dimensões:

$$\Phi(r_{ij}) = -\frac{m_i m_j}{r_{ij}} \quad (3.3)$$

A energia potencial total V_{tot} de um sistema de N partículas será então [escrevendo V_{tot} apenas para distinguir do V do volume]:

$$V_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \Phi(r_{ij}) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{m_i m_j}{r_{ij}} \quad (3.4)$$

Buscando o limite contínuo, vamos escrever $m_i = \rho(r_i) \Delta^3 r_i$, resultando:

$$V_{\text{tot}} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\rho(r_i) \rho(r_j)}{r_{ij}} \Delta^3 r_i \Delta^3 r_j \longrightarrow -\frac{1}{2} \iint d^3 r_i d^3 r_j \frac{\rho(r_i) \rho(r_j)}{r_{ij}}$$

Assumindo um sistema homogêneo e isotrópico tal que $\rho(r_i) = \rho \propto N/V$, sendo $V \propto L^3$ o volume, vem:

$$V_{\text{tot}} = -\frac{\rho^2}{2} \iint d^3 r_i d^3 r_j \frac{1}{r_{ij}} = -\frac{\rho^2}{2} \int d^3 R \int d^3 r \frac{1}{r}$$

A passagem mais à direita envolveu a mudança de variáveis corriqueira para coordenadas relativa e de centro de massa. Para evitar qualquer divergência a curtas distâncias, discussão importante porém desnecessária aqui, vamos regularizar o potencial de interação, assumindo que a distância mínima entre quaisquer duas partículas seja $r_0 > 0$ [introdução de um *cutoff*, que fisicamente pode

representar esferas rígidas, limite quântico etc]. Deste modo:

$$V_{\text{tot}} = -\frac{\rho^2}{2}V4\pi \int_{r_0}^L dr \frac{r^2}{r} = -\frac{\rho^2}{2}V4\pi r_0^2 \int_1^{L/r_0} dr' \frac{r'^2}{r'} \quad \text{com:} \quad r' = r/r_0$$

Dividindo ambos os lados por N obtemos [A é uma constante positiva]:

$$\frac{V_{\text{tot}}}{N} = -\frac{4\pi}{2} \frac{\rho^2}{N/V} r_0^2 \int_1^{L/r_0} dr \frac{r^2}{r} = -A \int_1^{L/r_0} dr \frac{r^2}{r} \quad (3.5)$$

que diverge em um sistema ilimitado espacialmente [$L \rightarrow \infty$]. Formalmente esta divergência era esperada, uma vez que a interação (3.3) em três dimensões viola o critério de estabilidade, que é uma condição de forma geral necessária para a existência do limite termodinâmico [mais detalhes a seguir]. Podemos usar a Eq. (3.5) para definir as regiões de longo [$\alpha \leq d$] e de curto alcance [$\alpha > d$]. Com efeito, para o caso geral d -dimensional em que o potencial de pares tenha dependência $\Phi(r) \propto 1/r^\alpha$, ficamos[¶]:

$$\frac{V_{\text{tot}}}{N} \propto \int_1^\infty dr \frac{r^{d-1}}{r^\alpha} = \left. \frac{r^{d-\alpha}}{d-\alpha} \right|_1^\infty = \begin{cases} < \infty & \text{se } \alpha/d > 1 \quad (\text{curto alcance}) \\ \rightarrow \infty & \text{se } 0 \leq \alpha/d \leq 1 \quad (\text{longo alcance}) \end{cases} \quad (3.6)$$

O passo decisivo dado na Ref. [45] foi, inspirando-se em $V \propto L^3 \propto N$ [caso 3-dimensional], reescrever a última expressão substituindo o limite superior de integração por $N^{1/d}$, resultando:

$$\frac{V_{\text{tot}}}{N} \propto \int_1^{N^{1/d}} dr \frac{r^{d-1}}{r^\alpha} = \left. \frac{r^{d-\alpha}}{d-\alpha} \right|_1^{N^{1/d}} = \frac{1}{d} \frac{N^{1-\alpha/d} - 1}{1 - \alpha/d}$$

donde segue o comportamento assintótico para N grande descrito após a Eq. (3.1):

$$\frac{N^{1-\alpha/d} - 1}{1 - \alpha/d} \sim \begin{cases} \frac{1}{\alpha/d - 1} & \text{se } 1 < \alpha/d < \infty \\ \ln N & \text{se } \alpha/d = 1 \\ N^{1-\alpha/d} & \text{se } 0 \leq \alpha/d < 1 \end{cases} \quad (3.7)$$

3.3 Conjectura de Tsallis

Os autores na Ref. [45], ao analisarem um modelo para ferrofluido cujo potencial de pares a longas distâncias é descrito pela Eq. (3.2), verificaram numericamente que um fator de escala como o da Eq. (3.7), ao qual nos referiremos também como \tilde{N} , era necessário a fim de obter valores finitos das grandezas termodinâmicas para qualquer α . Na ocasião, o potencial de interação não foi reescalado diretamente como fizemos no Cap. 2 [escalamento de Tsallis]; de forma equivalente, foi verificado que a quantidade adequada a ser sondada nas simulações para $N \rightarrow \infty$ era $E/N\tilde{N}$, e não

[¶]Tal definição de curto e longo alcance, associada à integrabilidade do potencial, não é única. Para uma definição associada à universalidade de propriedade críticas, ver [55] e suas referências. O caso marginal $\alpha = d$ pode envolver algumas sutilezas a mais, relacionadas à possibilidade de convergência condicional; no caso dos spins, à convergência condicional da soma (3.12), ver [44, 56].

simplesmente a energia total por partícula E/N , quantidade que divergia conforme N aumentava [sistema não extensivo]. Chega-se, assim, a duas possíveis rotas para tratar de sistemas com interação de longo alcance como os abordados aqui: uma é reescalar o potencial de interação, que significa uma modificação microscópica do modelo; outra é trabalhar com novas variáveis termodinâmicas[¶]. Esta segunda interpretação foi lançada na Ref. [57] e teve sua estrutura formal explorada por diversos autores, sendo algumas vezes chamada de *conjectura de Tsallis*. Ela nos leva a uma reformulação da termodinâmica intimamente relacionada com a necessidade da entropia ser uma quantidade extensiva. Pois vejamos.

Consideremos a transformação de Legendre bastante geral de uma energia termodinâmica G referente a um sistema d -dimensional genérico:

$$G(T, p, \mu, H, \dots) = U(S, V, N, M, \dots) - TS + pV - \mu N - HM - \dots \quad (3.8)$$

T, p, μ, H representam temperatura, pressão, potencial químico e campo magnético externo respectivamente; e U, S, V, N, M representam energia interna, entropia, volume, número de partículas e magnetização. Podemos identificar três tipos de variáveis: **(i)** aquelas que esperamos que sejam sempre extensivas, (S, V, N, M, \dots) , quer dizer, que escalam com o tamanho do sistema $V \propto L^d$; **(ii)** aquelas associadas às condições externas onde o sistema se encontra, (T, p, μ, H, \dots) , que escalam com L^θ ; e **(iii)** as que representam energias, (G, U) , que escalam com L^ϵ . Sistemas termodinâmicos convencionais são caracterizados por $\theta=0$ e $\epsilon=d$. Neste caso, tanto as energias quanto as variáveis extensivas escalam com L^d , não havendo diferença entre as variáveis das classes **(i)** e **(iii)**, sendo todas extensivas, ao passo que as variáveis da classe **(ii)** são independentes do tamanho do sistema, escalam com L^0 . Entretanto, existem sistemas físicos em que $\epsilon = \theta + d$ com $\theta \neq 0$. Vamos dividir então a Eq. (3.8) por $L^\epsilon = L^{\theta+d}$ e escrever:

$$\frac{G}{L^{\theta+d}} = \frac{U}{L^{\theta+d}} - \frac{T}{L^\theta} \frac{S}{L^d} + \frac{p}{L^\theta} \frac{V}{L^d} - \frac{\mu}{L^\theta} \frac{N}{L^d} - \frac{H}{L^\theta} \frac{M}{L^d} - \dots \quad (3.9)$$

Considerando agora o limite termodinâmico na forma $L \rightarrow \infty$, vem^{¶¶}:

$$\tilde{g} = \tilde{u} - \tilde{T}s + \tilde{p}v - \tilde{\mu}\rho - \tilde{H}m - \dots \quad (3.10)$$

Nesta última equação, usando uma notação compacta, $(\tilde{g}, \tilde{u}) = \lim_{L \rightarrow \infty} (G, U)/L^{\theta+d}$ representam as energias, $(s, v, \rho, m) = \lim_{L \rightarrow \infty} (S, V, N, M)/L^d$ representam as variáveis extensivas habituais e $(\tilde{T}, \tilde{p}, \tilde{\mu}, \tilde{H}) = \lim_{L \rightarrow \infty} (T, p, \mu, H)/L^\theta$, as que são normalmente intensivas. Para sistemas convencionais, temos $\theta = 0$ e $\epsilon = d$, de modo que as energias tornam-se extensivas, $(\tilde{g}, \tilde{u}) = (g, u)$, e as variáveis intensivas são recuperadas, $(\tilde{T}, \tilde{p}, \tilde{\mu}, \tilde{H}) = (T, p, \mu, H)$. Esta é a situação usual, que encerra, *e.g.*, um gás real interagindo via potencial de Lennard-Jones, o modelo de Ising etc. No

[¶]Especificamente para sistemas Hamiltonianos como o definido pela Eq. (2.5), essas duas possibilidades se misturam. Devido ao termo cinético, o fator \tilde{N} que reescala a energia potencial pode ser incorporado ao tempo, como será discutido na Sec. 4.2, Pág. 29.

^{¶¶}Apenas nesta seção, designaremos respectivamente por u e m as densidades de energia e magnetização; nas demais, continuaremos representando-as como U e M , em maiúsculas, preservando a notação mais comum na literatura que analisa sistemas clássicos de spins inerciais. Também, H aqui representa o campo magnético e não o Hamiltoniano sem termo cinético, certo de não haver confusão.

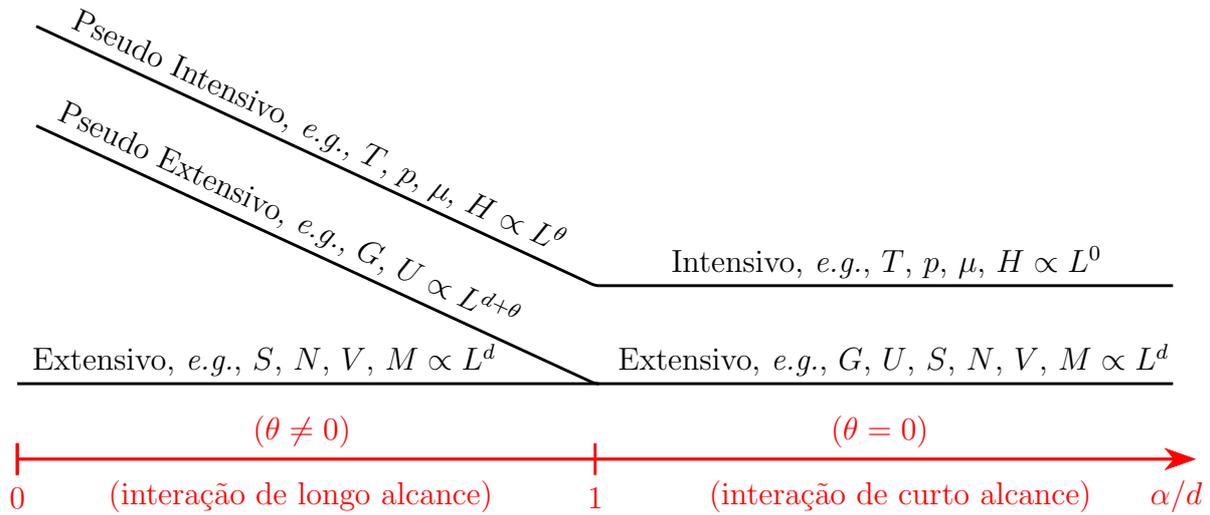


Fig. 3.1: Representação dos diferentes regimes da Eq. (3.9) para um sistema clássico d -dimensional caracterizado por um potencial de pares atrativo da forma $1/r^\alpha$, com $\alpha \geq 0$. Na região de longo alcance $0 \leq \alpha/d \leq 1$, podemos distinguir três classes de variáveis termodinâmicas: aquelas que escalam com L^θ , pertencentes ao ramo definido como *pseudo intensivo* [L é um comprimento linear de modo que o volume $V \propto L^d$, e θ é um parâmetro dependente do modelo], aquelas que escalam com $L^{d+\theta}$, do ramo *pseudo extensivo* [as energias], e as que escalam simplesmente com L^d , sendo sempre extensivas. Na região de curto alcance $\alpha > d$, temos $\theta = 0$ e os ramos pseudo extensivo e extensivo se unificam: as energias recuperam a propriedade de escalar com o tamanho do sistema L^d , tal como S, V, N , etc; ao passo que as variáveis previamente pseudo intensivas tornam-se genuinamente intensivas, independentes do tamanho L . O comportamento termodinâmico peculiar aqui ilustrado foi verificado inúmeras vezes na literatura.

entanto, para sistemas não convencionais, para os quais $\theta \neq 0$, a relação (3.10) também já foi abundantemente verificada, ou de forma indireta, por meio da introdução do fator de escala \tilde{N} no potencial de interação, ou trabalhando-se explicitamente com as variáveis termodinâmicas modificadas $\tilde{g}, \tilde{u}; \tilde{T}, \tilde{p}, \tilde{\mu}, \dots$ e as equações de estado pertinentes, por exemplo, $m = m(\tilde{H}, \tilde{T})$. Além de preservar relações termodinâmicas importantes, tais como as de Euler e Gibbs-Duhem [58], a conjectura simbolizada pela Eq. (3.10) foi evidenciada experimentalmente na Ref. [59], contendo o Cap. 3 de [10] uma lista bastante completa de outros resultados [além dos já mencionados na seção anterior]. Aqui, trabalharemos reescalando o potencial. Verificações indiretas portanto de (3.10) serão exibidas nos Caps. 4 e 5, associadas aos artigos [3, 4]. Deve ser observado que as relações termodinâmicas (3.9) e (3.10), para sistemas convencionais ou não, tratam de forma equânime entropia S , volume V e número de elementos N , e dificilmente haverá dúvidas a respeito da extensividade destas duas últimas variáveis. De fato, uma análise análoga poderia ter sido feita considerando N no lugar de V , uma vez que no limite termodinâmico esperamos a razão V/N constante.

Um exemplo de sistema não convencional com $\theta \neq 0$ pode ser obtido do sistema Hamiltoniano introduzido no Cap. 2. Ao não escalarmos a energia potencial na Eq. (2.5) com o fator \tilde{N} , a energia interna crescerá como $U \sim N\tilde{N}$, e, de acordo com a Eq. (3.7), teremos $\theta = d - \alpha$ sempre que $0 \leq \alpha \leq d$ [longo alcance], e $\theta = 0$ para $\alpha > d$ [curto alcance]. Especificamente para o sistema clássico considerado, este comportamento peculiar reflete o decaimento em lei de potência $1/r^\alpha$ da interação. Comportamento termodinâmico fora do convencional porém, não deve ser associado exclusivamente ao alcance da interação nesse sentido clássico. Uma descrição mais ampla poderia

empregar *correlações de longo alcance* [temporais ou espaciais], expressão que abrange, por exemplo, sistemas quânticos fortemente emaranhados, cujas correlações não estão necessariamente ligadas ao alcance da interação [um exemplo quântico é discutido na Sec. 4.14.1, Pág. 66]. Entretanto, a imagem clássica de uma interação de curto ou longo alcance, diretamente relacionada com a distância r , tem a vantagem de exprimir de forma bastante clara as relações termodinâmicas (3.9) e (3.10) e seus diferentes regimes, como ilustra a Fig. 3.1.

3.4 Sobre o Limite Termodinâmico

Uma diferença importante entre o potencial dos sistemas de spins clássicos analisados aqui e o de sistemas contínuos clássicos como o gravitacional, é que, embora ambos dependam da distância como lei de potência $\Phi(r) \propto 1/r^\alpha$, as variáveis dinâmicas são distintas [os spins estão fixos na rede; são *lattice systems*]. Na gravitação, a variável de integração no espaço de fases é a própria distância r ; no caso dos spins, lidamos com variáveis associadas aos graus de liberdade do vetor \mathbf{S} . Este vetor pode ser expresso em função do ângulo θ se $n = 2$, $\mathbf{S} = \mathbf{S}(\theta)$, ou em função de θ e φ se $n = 3$, $\mathbf{S} = \mathbf{S}(\theta, \varphi)$. Para o modelo α -XY por exemplo [$n = 2$], o potencial entre pares de spins tem a forma $\Phi(\theta_{ij}; r_{ij}) \propto [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)]/r_{ij}^\alpha$ [ver Eq. (4.1), Pág. 26].

Em sistemas contínuos, questões referentes à existência do limite termodinâmico estão intimamente ligadas a propriedades da interação, notadamente à sua qualidade de ser *temperada* e ao critério de *estabilidade* [*temperedness* e *stability*]. Temperado é uma característica que pode ser associada ao potencial de pares $\Phi(r_{ij})$ enquanto estabilidade é normalmente associada ao potencial total $V_{\text{tot}} = \sum \Phi(r_{ij})$. Estabilidade significa que existe $B \geq 0$ independente de N tal que, para *qualquer* configuração do sistema, a seguinte desigualdade se verifique:

$$V_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \Phi(r_{ij}) \geq -BN \quad (3.11)$$

A atração gravitacional (3.3) representa um duplo problema à estabilidade. Por não ser limitada inferiormente, a condição (3.11) é violada quando $r \rightarrow 0$. Introduzindo um *cutoff* em r_0 , o problema a curtas distâncias é eliminado, mas a estabilidade não é recuperada porque a interação não cai [em módulo] suficientemente rápido quando $r \rightarrow \infty$, e a soma apresenta um crescimento [em módulo] com N mais que linear[¶]. Uma interação de pares com núcleo duro é estável caso respeite $\Phi(r) \geq -A_1/r^{d+\delta_1}$ para $r \geq r_0$, com $A_1 > 0$ e $\delta_1 > 0$, que é a condição de curto alcance vista na Eq. (3.6) [$\alpha = d + \delta_1 > d$]. O núcleo duro pode ser substituído por $\Phi(r) \geq A_2/r^{d+\delta_2}$ para $r \rightarrow 0$, com $A_2 > 0$ e $\delta_2 > 0$ [e.g., potencial de Lennard-Jones, em que $\Phi(r) \sim 1/r^{12}$ para $r \rightarrow 0$]. Interação temperada é aquela que cai suficientemente rápido com a distância. Em símbolos, se $\Phi(r)$ é temperado, então:

$$\Phi(r) \leq C/r^{d+\delta} \quad \text{para} \quad r \geq R_0 > 0; \quad C > 0 \text{ e } \delta > 0$$

[¶]Com efeito, da Eq. (3.7) com $\alpha = 1$ e $d = 3$, temos $V_{\text{tot}}/N \propto -N^{2/3}$ para N grande. Subindo mais um pouco à Eq. (3.5), que é uma estimativa da soma (3.4), usando $\rho = N/V$ e $V = 4\pi L^3/3$, vem: $|V_{\text{tot}}|/N = \pi\rho[L^2 - r_0^2] = 3N/4L + A/2 \propto N/V^{1/3} \propto N^{2/3}$. Fixar a razão $N/L \propto N/V^{1/3}$ quando $N \rightarrow \infty$ e $V \rightarrow \infty$ é o *limite termodinâmico diluído* empregado em sistemas gravitacionais [43]. Esse limite pode ser acomodado na conjectura de Tsallis (3.9) com $\theta = d - 1 = 2$.

que corresponde novamente à condição de curto alcance da Eq. (3.6), mas agora por cima. A combinação das propriedades temperado e estabilidade assegura que $\Phi(r) \rightarrow 0$ quando $r \rightarrow \infty$. A repulsão Coulombiana não é temperada, mas um sistema de partículas de cargas iguais é estável [$B=0$ em (3.11)], bem como um sistema de cargas opostas com a divergência em $r \rightarrow 0$ contornada.

Fisicamente, temperado implica que a parte positiva da energia de interação entre partículas é negligenciável a grandes distâncias, já a parte negativa é controlada pelo critério de estabilidade (3.11), que garante que a interação seja limitada inferiormente e que V_{tot} não decresça mais que linearmente com N ; ambas as condições relacionam-se com a extensividade da energia. Quando estas condições são satisfeitas, é possível mostrar que o limite termodinâmico existe. Especificamente, nos limites $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, com N/V constante, a energia livre por partícula:

$$F = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln Z}{N}$$

tem um valor bem definido quando a interação é estável e temperada. Também, com a estabilidade violada, a grande função de partição diverge. Para um sistema interagindo exclusivamente via potencial de pares, as restrições suficientes sobre $\Phi(r)$ para que o limite termodinâmico exista podem ser unificadas da seguinte forma: **(i)** $\Phi(r)$ deve ser limitado inferiormente, *i.e.*, $\Phi(r) > -A_1 \forall r$; **(ii)** $\Phi(r) \geq A_2/r^{d+\delta_2}$ quando $r \rightarrow 0$; e **(iii)** $|\Phi(r)| \leq A_3/r^{d+\delta_3}$ quando $r \rightarrow \infty$, em que A_i e δ_i são constantes positivas. A restrição **(iii)** é basicamente a condição de curto alcance na Eq. (3.6), tanto pelo lado positivo quanto pelo negativo. Esse resultado foi demonstrado por Fisher [60], e aqui estamos seguindo as definições[¶] adotadas por Ruelle [62, Cap. 3]. Gibbs [13] havia identificado essas limitações e foi cuidadoso ao argumentar que a função de partição deve ter um valor finito. Ele cita, na Pág. 35, explicitamente a interação gravitacional e o problema relacionado à origem $r \rightarrow 0$, que faz com que Z divirja mesmo em um volume finito [pois $\int_0^\delta dr r^2 e^{1/r} = \infty \forall \delta > 0$], embora a gravitação tenha também o problema a longas distâncias, que se manifesta, no ensemble canônico, quando $N \rightarrow \infty$ e $V \rightarrow \infty$.

No caso de spins localizados, a discussão é um pouco simplificada. Como a menor distância entre quaisquer dois pares de spins é $r_{ij}=1$, não há a possibilidade da interação decrescer indefinidamente com $r \rightarrow 0$ e apenas o comportamento quando $r \rightarrow \infty$ precisa ser avaliado. Com o objetivo de compatibilizar a notação com a de outros trabalhos [39, 46, 63], vamos redefinir a constante de acoplamento J na Eq. (2.5) de modo que a energia potencial se reescreva como:

$$V_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N J_{ij} [1 - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j] \quad \text{com:} \quad J_{ij} = \frac{J}{N} \frac{1}{r_{ij}^\alpha} \quad \text{e:} \quad r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$$

Para sistemas de spins clássicos assim, a existência do limite termodinâmico é assegurada — e isso significa o valor finito do limite exibido na Eq. (2.9) — caso a seguinte condição se verifique:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N |J_{ij}| = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{j \neq i}^N |J_{ij}| < \infty \quad (3.12)$$

[¶]Gallavotti [61, Cap. 4] apresenta uma discussão clara sobre o limite termodinâmico, explorando em detalhes as consequências físicas de uma interação não estável e não temperada. Notar, porém, que ele classifica de temperada a interação que respeita $|\Phi(r)| \leq C/r^{d+\delta}$, com o módulo, que é distinta da do Ruelle [62].

Da definição de \tilde{N} na Eq. (3.1), é imediato constatar que esta condição é satisfeita:

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N |J_{ij}| = \sum_{j \neq i}^N |J_{ij}| = \frac{J}{\tilde{N}} \sum_{j \neq i}^N \frac{1}{r_{ij}^\alpha} = J \quad (J > 0)$$

Recuperar a extensividade por meio do escalamento de Tsallis (3.1) implica então garantir a existência do limite termodinâmico. A condição (3.12) relaciona-se com o critério de estabilidade (3.11). De fato, usando a desigualdade triangular $|x + y| \leq |x| + |y|$ e depois a normalização dos spins $-1 \leq \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \leq 1$, vem:

$$|V_{\text{tot}}| = \left| \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N J_{ij} [1 - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j] \right| \leq \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N |J_{ij} [1 - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j]| \leq \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N |J_{ij}|$$

Portanto:

$$|V_{\text{tot}}| \leq \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N |J_{ij}| = JN \Rightarrow \begin{cases} V_{\text{tot}} \leq JN & \text{se } V_{\text{tot}} > 0 \\ V_{\text{tot}} \geq -JN & \text{se } V_{\text{tot}} < 0 \end{cases}$$

Em outras palavras, a condição (3.12) satisfaz automaticamente uma versão equivalente do critério de estabilidade, e, por envolver o módulo, garante que J_{ij} decaia de forma “temperada” pelo lado positivo [*i.e.*, $J_{ij} \leq C/r_{ij}^{d+\delta}$ se $\tilde{N} = 1$], porém essa nomenclatura não é usada em sistemas de spins, apenas em sistemas contínuos. Ruelle [62], no Cap. 2, trata do limite termodinâmico de sistemas de spins clássicos localizados, mas aqui nos guiamos principalmente pelo Griffiths [63], trabalho inaugural da série Domb & Green.

No próximo capítulo iniciaremos a análise numérica do modelo (2.5). As simulações serão em dinâmica molecular com os spins fixos em uma rede unidimensional. Essa discussão envolvendo sistemas contínuos contudo, talvez ajude a apreciar os trabalhos pioneiros [46, 47, 50, 57] que utilizaram em spins localizados o escalamento (3.7), que fora originalmente motivado pela investigação de um sistema contínuo [45].

Capítulo 4

Rotores XY ($n = 2$)

Este capítulo é dedicado ao modelo α -XY e sua relação com a mecânica estatística não extensiva. O principal objetivo é investigar como o parâmetro α afeta o valor de q observado na distribuição de velocidades do sistema. Uma discussão sobre o estado quase estacionário (QSS) também é apresentada. O enfoque é predominantemente numérico [dinâmica molecular] e grande parte dos resultados apresentados podem ser acessados também na Ref. [3].

4.1 Modelo α -XY

O modelo α -XY é definido como o caso particular $n = 2$ da Eq. (2.5). Neste caso, cada rotor \mathbf{S}_i fixo na posição \mathbf{r}_i da rede pode variar continuamente sua direção em um círculo de raio unitário, o vínculo $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_i = 1$ se resolve então como $\mathbf{S}_i = \cos \theta_i \hat{\mathbf{x}} + \sin \theta_i \hat{\mathbf{y}}$, e a função Hamiltoniana do sistema se escreve [adotando $J=1$]:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N p_i^2 + \frac{1}{2\tilde{N}} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1 - \cos(\theta_i - \theta_j)}{r_{ij}^\alpha} = K + V \quad (\alpha \geq 0) \quad (4.1)$$

Em dimensão $d = 1$ considerando condições periódicas de contorno, podemos visualizar os spins arranjados num anel, de modo que as possíveis distâncias [adimensionais] entre eles assumem os valores $r_{ij} = 1, 2, 3, \dots, N/2$. Nesta situação unidimensional sob condições periódicas, o foco de nossas simulações, a constante \tilde{N} definida na Eq. (3.1) fica:

$$\tilde{N} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1}{r_{ij}^\alpha} = \frac{1}{(N/2)^\alpha} + 2 \sum_{m=1}^{N/2-1} \frac{1}{m^\alpha} = \begin{cases} N-1 & \text{se } \alpha = 0 \\ 2 & \text{se } \alpha \rightarrow \infty \end{cases} \quad (d = 1) \quad (4.2)$$

Designando o potencial na Eq. (4.1) por $V(\alpha)$ mais uma vez, seus dois extremos [$\alpha = 0$, sistema globalmente acoplado, e $\alpha \rightarrow \infty$, interação entre primeiros vizinhos] são dados por:

$$V(0) = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)] \quad (\text{potencial do HMF})$$

e [sob condições periódicas, $\theta_{N+1} = \theta_1$]:

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} V(\alpha) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N [1 - \cos(\theta_i - \theta_{i+1})] \quad (d = 1)$$

As soluções canônicas para a energia interna são [adotando $k_B = 1$]:

$$U(M, T) = \begin{cases} \frac{T}{2} + \frac{1}{2} [1 - M^2] & \text{para } 0 \leq \alpha < d = 1 \\ \frac{T}{2} + \frac{1}{2} \left[1 - \frac{I_1(1/2T)}{I_0(1/2T)} \right] & \text{para } \alpha \rightarrow \infty \text{ e } d = 1 \end{cases} \quad (4.3)$$

e para a magnetização:

$$M(T) = \begin{cases} M = \frac{I_1(M/T)}{I_0(M/T)} & \text{para } 0 \leq \alpha < d = 1 \\ M = 0 & \text{para } \alpha \rightarrow \infty \text{ e } d = 1 \end{cases} \quad (4.4)$$

expressões advindas das Eqs. (2.13) e (2.14) com $n = 2$ e representadas graficamente na Fig. 2.1 e também na Fig. 4.1 a seguir. O parâmetro de ordem M é a magnitude do vetor magnetização, $M = |\langle \mathbf{M} \rangle|$, o qual, para o sistema (4.1), pode ser calculado microscopicamente em função dos ângulos θ_i 's como:

$$\mathbf{M} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \cos \theta_i \hat{\mathbf{x}} + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sin \theta_i \hat{\mathbf{y}} = M_x \hat{\mathbf{x}} + M_y \hat{\mathbf{y}} \quad (4.5)$$

Os valores críticos associados à solução na região de longo alcance $\alpha < 1$ valem $[T_c, U_c] = [1/2, 3/4]$, conforme Eq. (2.11). Particularmente em $U = 0.69 < U_c$, as Eqs. (4.3) e (4.4) fornecem $T \approx 0.47535$ e $M \approx 0.30880$ para $0 \leq \alpha < 1$, e $T \approx 0.71138$ [e $M = 0$] para $\alpha \rightarrow \infty$. Este valor específico da energia será explorado de forma acentuada nas investigações numéricas subsequentes, chamaremos então as respectivas temperaturas de T_{BG} e de T_∞ [ver Fig. 4.3 mais abaixo] e de M_{BG} a magnetização [ver Figs. 4.2]. O índice BG responde como de costume por Boltzmann-Gibbs e enfatiza a origem canônica de equilíbrio de T_{BG} e M_{BG} , preocupação relevante neste trabalho. Com efeito, violando a solução (4.3) na região $0 \leq \alpha < 1$ impondo $M = 0$ para qualquer energia, obtemos $T = 2U - 1$, resultando em $T = T_{QSS} = 0.38$ quando $U = 0.69$. O acrônimo QSS responde por *Quasi Stationary State*, expressão que denomina um estado real, persistente temporalmente, atingido pelo sistema numa faixa de energia e determinada condição inicial no qual os valores de temperatura e magnetização diferem daqueles derivados pela mecânica estatística tradicional. Para N finito, as simulações numéricas mostram que após um período suficientemente longo, o sistema abandona este regime meta estável e relaxa para o “*equilíbrio*”, alcançando os valores de T e M previstos pelas soluções (4.3) e (4.4), saindo, quando $U = 0.69$, de T_{QSS} para T_{BG} no caso da temperatura, e de $M_{QSS} = 0$ para M_{BG} no caso da magnetização [ver Fig. 4.2]. O estado quase estacionário é um fenômeno exibido pelo modelo α -XY na região de longo alcance $0 \leq \alpha \leq d$, cuja duração depende do tamanho N do sistema, relacionado a quebra de ergodicidade, calor específico negativo etc, sobre o qual falaremos mais mais adiante. Ademais, a palavra *equilíbrio* foi enfatizada logo acima porque, como veremos, mesmo após atingir os valores de T e M deduzidos analiticamente, distribuições de velocidades diferentes da Maxwelliana são observadas nas simulações. Esses comportamentos anômalos, que não se manifestam na região de curto alcance $\alpha > d$, são alguns dos fatores que contribuem para o interesse de diversos pesquisadores sobre este modelo.

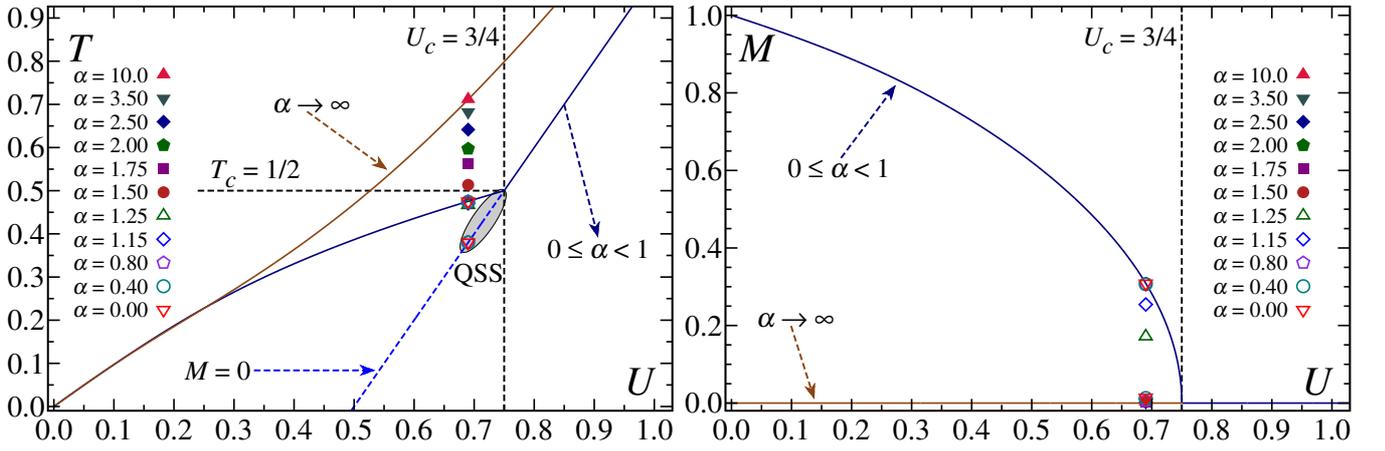


Fig. 4.1: **Linhas:** Solução analítica do modelo α -XY unidimensional para $0 \leq \alpha < 1$ e $\alpha \rightarrow \infty$ [cf. Eqs. (4.3) e (4.4)]. Estes dois gráficos foram apresentados anteriormente na Fig. 2.1. Aqui são exibidos também alguns resultados numéricos para $U = 0.69$ e, no gráfico T vs. U , o prolongamento a energias $U < U_c$ da curva correspondente à solução na região de longo alcance considerando $M = 0$ [função $T = 2U - 1$, $M = 0$ na Eq. (4.3)]. Sobre este prolongamento há uma região sombreada, indicada com QSS, demarcando a faixa de energia $U \in [0.68, U_c]$ associada a estados quase estacionários de magnetização nula observados nas simulações. **Pontos:** Os valores numéricos representam médias temporais calculadas após ou durante o QSS. Para $\alpha > 1$ não detectamos QSS's de duração apreciável. Conforme o parâmetro α aumenta, os resultados numéricos aproximam-se da curva correspondente ao modelo com $\alpha \rightarrow \infty$, sendo esta aproximação suave no caso da temperatura e bem mais abrupta no caso da magnetização [desconhecemos solução analítica nesta região intermediária entre $1 \leq \alpha < \infty$]. Para $\alpha < 1$, médias temporais durante o QSS coincidem com o prolongamento de magnetização nula da solução analítica. Após o QSS ou quando $\alpha > 1$, médias temporais concordam com os resultados analíticos conhecidos. Tanto os valores canônicos $(T_{BG}, T_\infty, M_{BG}) \approx (0.475, 0.711, 0.309)$ quanto os associados ao prolongamento de magnetização nula $(T_{QSS}, M_{QSS}) = (0.38, 0)$, foram observados com bastante precisão em simulações com N grande. A Fig. 4.2 a seguir exhibe a transição dinâmica da temperatura $T(t)$ e da magnetização $M(t)$ dos valores no QSS, T_{QSS} e M_{QSS} , para os valores canônicos, T_{BG} e M_{BG} ; já na Fig. 4.3 é apresentada também a passagem de T_{BG} para T_∞ conforme α cresce. Resultados numéricos para $\alpha = 0.0$ e 0.4 foram obtidos com $N = 30\,000$, os demais, com $N = 200\,000$. Médias temporais correspondem a uma única realização do sistema (4.1).

O modelo α -XY definido na Eq. (4.1) foi proposto por Anteneodo & Tsallis em 1998 [50]. Ele recupera, quando $\alpha = 0$, o modelo HMF [*Hamiltonian Mean Field*], proposto alguns anos antes por Antoni & Ruffo [52], e recupera, quando $\alpha \rightarrow \infty$, o modelo inercial de rotores XY, introduzido possivelmente na Ref. [64]. Neste último caso, excluindo o termo cinético, recaímos no modelo n -vetorial [$n=2$] discutido no Cap. 2, cuja interação se dá apenas entre vizinhos mais próximos [curto alcance], sendo, portanto, adequadamente descrito pela termoestatística convencional. O modelo α -XY, sobretudo seu caso particular $\alpha=0$, tem sido largamente estudado nos últimos anos [ver [3, 10, 65, 66] e suas referências] e é considerado um modelo paradigmático para o entendimento da intersecção entre mecânica estatística e sistemas Hamiltonianos com interação de longo alcance. Relativamente às soluções canônicas expressas nas Eqs. (4.3) e (4.4), a resposta para o caso de alcance infinito $\alpha=0$ foi obtida em [52] e estendida para qualquer $\alpha < d$ em [53], contanto que condições periódicas de contorno fossem impostas e a quantidade \tilde{N} definida de acordo com a Eq. (4.2). Já a solução para o potencial correspondente a $\alpha \rightarrow \infty$ [$d=1$] foi deduzida por Joyce [67] adotando condições periódicas — resposta, no limite $N \rightarrow \infty$, idêntica ao caso de bordas livres, como apontou o próprio Joyce e em mais detalhes Stanley [34]. Como comentado, na região $1 \leq \alpha < \infty$, não há

solução analítica de nosso conhecimento.

4.2 Equações de Movimento e Procedimento Numérico

A Eq. (4.1) representa um genuíno sistema Hamiltoniano, com o momento p_i canonicamente conjugado à coordenada generalizada θ_i e dinâmica regida pelas Equações de Hamilton:

$$\dot{\theta}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} = p_i; \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta_i} = -\frac{1}{\tilde{N}} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\text{sen}(\theta_i - \theta_j)}{r_{ij}^\alpha}; \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (4.6)$$

As simulações foram realizadas em dimensão $d = 1$ sob condições periódicas de contorno [sistema arranjado num anel], com um número N fixo de rotores e também com energia fixa, sem termostato, de modo que a energia total E inicialmente atribuída ao sistema — quantidade que se mantém constante já que \mathcal{H} não depende explicitamente do tempo — deve ser identificada com a energia interna termodinâmica, $E/N = \langle \mathcal{H} \rangle / N = U$ para N grande [ensemble microcanônico]. Além da energia, o momento total $P = \sum p_i$ também é uma quantidade conservada [$\dot{P} = 0$], como podemos inferir diretamente da Eq. (4.6).

Aqui, é oportuno destacar brevemente um ponto relevante. O momento p_i envolve, pela Eq. (4.6), uma derivação com respeito ao tempo t . Isso permite uma transformação temporal que leva a Hamiltoniana (4.1) a ser escrita como:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{\tilde{N}} \left[\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \bar{p}_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1 - \cos(\theta_i - \theta_j)}{r_{ij}^\alpha} \right] = \frac{\bar{\mathcal{H}}}{\tilde{N}}$$

que define a nova Hamiltoniana $\bar{\mathcal{H}}$, associada ao tempo reescalado $\bar{t} = t/\sqrt{\tilde{N}}$. Nessa nova escala temporal, o sistema é descrito por uma função Hamiltoniana não extensiva $\bar{\mathcal{H}}$, que escala com $\langle \bar{\mathcal{H}} \rangle \sim N\tilde{N}$, podendo a extensividade ser recuperada por uma divisão posterior por \tilde{N} . Chegamos então a uma equivalência explícita também para sistemas de spins inerciais entre as duas abordagens discutidas no Cap. 3, quais foram: ou se modifica microscopicamente o sistema, acrescentando \tilde{N} ao potencial de interação [escalamento de Tsallis], ou se modifica a estrutura da termodinâmica, acomodando as novas variáveis pseudo intensivas e pseudo extensivas como ilustrado na Fig. 3.1 [conjectura de Tsallis]. Essa equivalência foi percebida e explorada numericamente na Ref. [50], não entraremos em mais detalhes aqui.

Para integrar as $2N$ equações de movimento (4.6) utilizamos majoritariamente o algoritmo simplético de Yoshida de quarta ordem [68, 69], escolhendo um passo de integração capaz de fornecer uma flutuação relativa da energia[¶] menor que 10^{-5} ; alguns poucos resultados aqui presentes foram obtidos pelo tradicional esquema de Runge-Kutta, também de quarta ordem. Todos os rotores foram iniciados com o mesmo ângulo $\theta_i = 0 \forall i$, com o respectivo momento p_i sorteado aleatoriamente de uma distribuição uniforme no intervalo $[-1, 1]$. Após o sorteio aleatório, os momentos p_i 's foram

[¶]Flutuação relativa calculada usando $\sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2} / \langle E \rangle$, com $\langle \cdot \rangle$ representando média temporal avaliada durante toda a evolução de um único sistema, de uma única realização. De forma geral, quanto maior o α e menor o tamanho N , maior é a flutuação relativa.

reescalados com a finalidade de anular o momento total e levar o sistema à energia desejada^{††}, tendo o valor inicial $P = \sum p_i = 0$ do momento total sido conservado com precisão muito maior do que a da energia no decorrer da evolução. Deste procedimento resulta, para energia $U = E/N$, uma distribuição uniforme de média nula e largura $2\sqrt{6U}$ para os momentos, energia potencial $V = 0$ e vetor magnetização de módulo um: $|\mathbf{M}| = |M_x \hat{\mathbf{x}}| = 1$, por (4.5). Essa condição inicial é conhecida como *water bag*.

4.3 Temperatura e Magnetização: Evolução e Média Temporal

Por meio do Teorema da Equipartição da Energia, podemos definir a temperatura cinética instantânea $T(t)$ como[‡]:

$$K(t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N p_i^2(t) = \frac{1}{2} N T(t) \Rightarrow T(t) = \frac{2K(t)}{N} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N p_i^2(t) \quad (4.7)$$

cuja média temporal deve, no equilíbrio, coincidir com a temperatura termodinâmica, $\langle T(t) \rangle_{\text{Tempo}} = T$, resultado válido também para a magnetização, $\langle M(t) \rangle_{\text{Tempo}} = M$, sendo o vetor magnetização $\mathbf{M}(t)$ ao longo do tempo calculado de acordo com a Eq. (4.5), donde[¶] $M(t) = |\mathbf{M}(t)| = \sqrt{M_x^2(t) + M_y^2(t)}$.

São precisamente estas duas quantidades dinâmicas, $T(t)$ e $M(t)$, que estão representadas na Fig. 4.2. Como podemos observar, a fim de coincidir com o resultado canônico das Eqs. (4.3) e (4.4), as médias temporais precisam ser calculadas após um intervalo suficientemente longo, a partir do qual $T(t)$ e $M(t)$ flutuam próximos aos valores preditos pela mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs [indicados com T_{BG} e M_{BG} na figura]; em outras palavras, após o sistema atravessar o estado quase estacionário (QSS), tema da próxima seção. Neste regime, no qual é esperado que a hipótese ergódica se aplique, médias temporais e de ensemble devem coincidir.

Mais acima na Fig. 4.1, para $U = 0.69$ e diversos valores de α , médias temporais calculadas após o QSS são exibidas, o acordo com as previsões analíticas é muito bom. Para $0 \leq \alpha < 1$, os resultados numéricos acumulam-se nos valores de T e M correspondentes à solução nesta região, $(T_{\text{BG}}, M_{\text{BG}}) \approx (0.475, 0.309)$ no caso. Conforme o valor do parâmetro α aumenta, os resultados numéricos aproximam-se da solução associada ao modelo com $\alpha \rightarrow \infty$, alcançando $T_\infty \approx 0.711$ em torno de $\alpha \lesssim 10$, transitando entre as soluções correspondentes a $\alpha < 1$ e a $\alpha \rightarrow \infty$ de forma suave no caso da temperatura e bastante abrupta no caso da magnetização [lembrando que na região intermediária entre $1 \leq \alpha < \infty$ não há solução analítica de nosso conhecimento]. Na Fig. 4.1 também estão

^{††}Primeiro $p_i \rightarrow p_i - \frac{1}{N} \sum p_i$ [momento total nulo], depois $p_i \rightarrow p_i \sqrt{(E_0 - V)/K}$ [sistema com energia E_0].

[‡] $n-1=2-1=1$ grau de liberdade por spin, resultando em $(n-1)N = N$ graus de liberdade no total. Rigorosamente, este valor deveria ser reduzido a $N-1$ em virtude da conservação do momento linear total, porém a diferença é irrelevante frente aos valores de N empregados aqui. A referência ao Teorema da Equipartição é relativa à forma algumas vezes chamada de generalizada, quer dizer, $\langle p_i \partial \mathcal{H} / \partial p_i \rangle = k_B T$, encontrada, *e.g.*, em Huang [70, Sec. 6.4], e, num contexto de simulações computacionais, em Allen & Tildesley [71, Sec. 2.4].

[¶]Observando atentamente, notamos uma comparação entre médias de ensemble e temporal de quantidades distintas: $\langle |\mathbf{M}(t)| \rangle_{\text{Tempo}}$ com $|\langle \mathbf{M} \rangle| = M$. Esta prática é comum em simulações com sistemas de spins [*e.g.*, [72]], uma vez que $\mathbf{M}(t)$ não é um vetor constante e eventualmente $\langle \mathbf{M}(t) \rangle_{\text{Tempo}} = \vec{0}$ mesmo para energias abaixo da crítica [$\mathbf{M}(t)$ pode executar um movimento periódico, por exemplo]; para N pequeno, tempos longos e energia próxima à crítica, há grande chance de $|\langle \mathbf{M}(t) \rangle_{\text{Tempo}}| \approx 0$ numa simulação do sistema (4.1). A comparação se justifica porque no limite termodinâmico \mathbf{M} é um vetor fixo, com módulo e direção definida, digamos $\mathbf{M} = |\mathbf{M}| \hat{\mathbf{x}}$, de modo que a média de ensemble comuta com o módulo: $\langle \mathbf{M} \rangle = \langle |\mathbf{M}| \rangle \hat{\mathbf{x}} \Rightarrow |\langle \mathbf{M} \rangle| = \langle |\mathbf{M}| \rangle$. Às vezes, pode ser relevante a investigação numérica do vetor $\langle \mathbf{M}(t) \rangle_{\text{Tempo}}$ [73], ou de grandezas tais como a “polarização” $p = \sum |\langle \mathbf{S}_i(t) \rangle_{\text{Tempo}}| / N$ [74, 75].

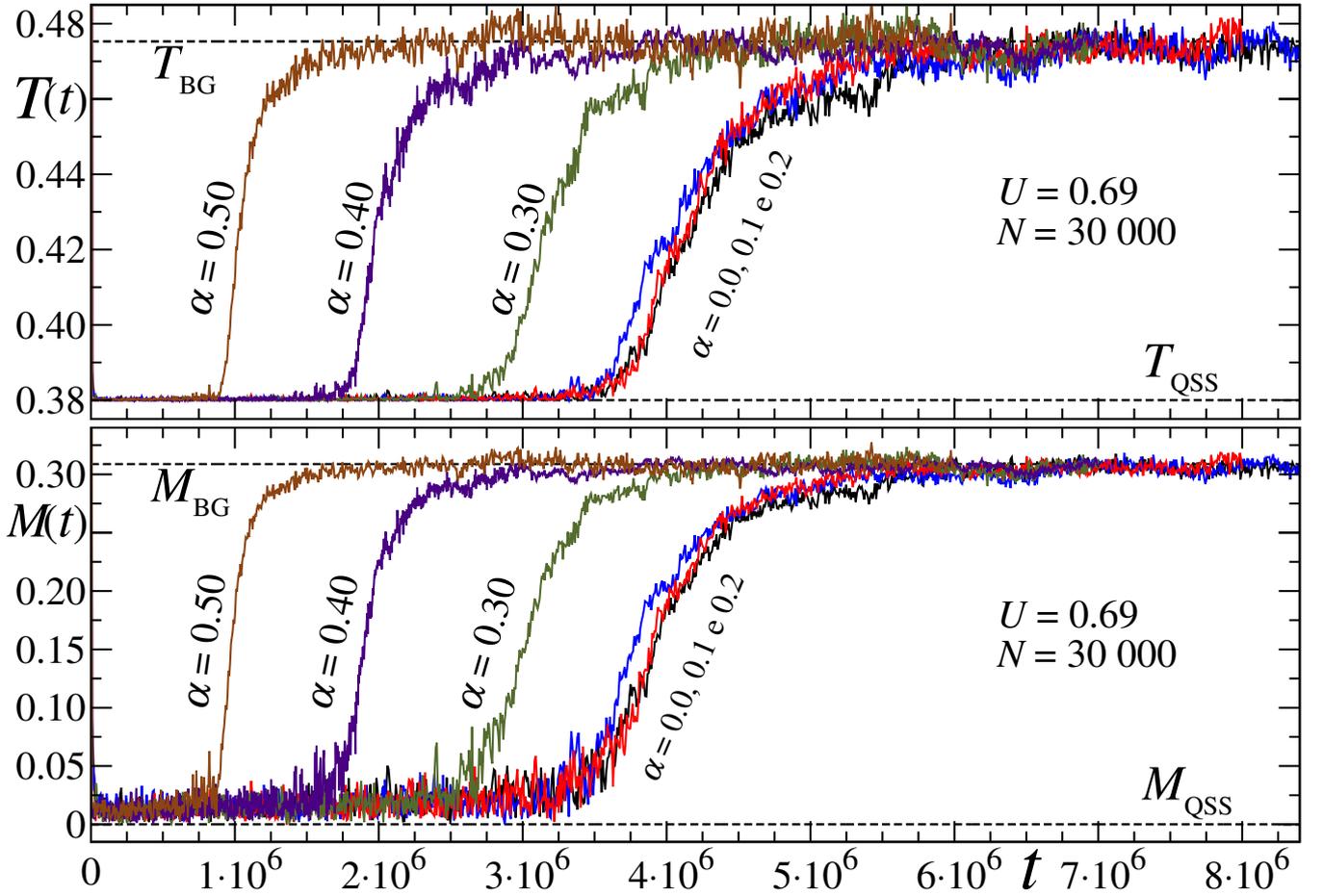


Fig. 4.2: Evolução temporal da temperatura cinética $T(t)$, acima, e do módulo do vetor magnetização $M(t)$, abaixo [cf. Eqs. (4.7) e (4.5) respectivamente], para $E/N = U = 0.69$, $N = 30\,000$ e 5 valores do parâmetro α entre $\alpha \in [0.0, 0.5]$. Ao ser preparado com a condição inicial descrita na Sec. 4.2, o sistema rapidamente atinge o estado quase estacionário (QSS) e lá permanece por um longo período, que depende de α e N [e também de U]. Para que as médias temporais de $T(t)$ e $M(t)$ coincidam com os valores analíticos $T_{\text{BG}} \approx 0.475$ e $M_{\text{BG}} \approx 0.309$ [cf. Eqs. (4.3) e (4.4), linhas tracejadas superiores], devemos calculá-las após este período. Para $U = 0.69$, as simulações revelam um QSS com magnetização bem próxima de zero e temperatura coincidindo com o prolongamento com $M = M_{\text{QSS}} = 0$ da solução canônica: $T_{\text{QSS}} = 2U - 1 = 0.38$ [linhas inferiores]. QSS's com estas características são observados na faixa de energia $U \in [0.68, U_c = 0.75]$ indicada de forma sombreada na Fig. 4.1. Médias temporais sobre as realizações com $\alpha = 0.0$ e 0.4 , durante e após o QSS, são mostradas na Fig. 4.1 mais acima. Na Fig. 4.3 a seguir é exibida a evolução de $T(t)$ para $\alpha > 0.5$.

representadas médias temporais calculadas *durante* o QSS. Para $\alpha \gtrsim 1$, não foram detectados estados quase estacionários de duração apreciável, mesmo para os maiores valores de N que utilizamos, como pode ser observado na Fig. 4.3 mais à frente. Para $0 \leq \alpha < 1$, os valores médios durante o QSS coincidem com o prolongamento de magnetização nula da solução analítica nesta região, quer dizer, coincidem com a curva $T = 2U - 1$, obtida violando-se a solução canônica (4.3) impondo $M = 0$. Este prolongamento em $U = 0.69$ fornece $(T_{\text{QSS}}, M_{\text{QSS}}) = (0.38, 0)$, valores recuperados nas simulações também com bastante precisão.

Os resultados numéricos na Fig. 4.1 correspondem à evolução temporal de $T(t)$ e de $M(t)$ exibidas nas Figs. 4.2 e 4.3. Como utilizamos valores de $N \geq 30\,000$, as médias temporais foram calculadas sobre uma *única* realização do sistema (4.1), sem nenhum tipo de média sobre eventos distintos [en-

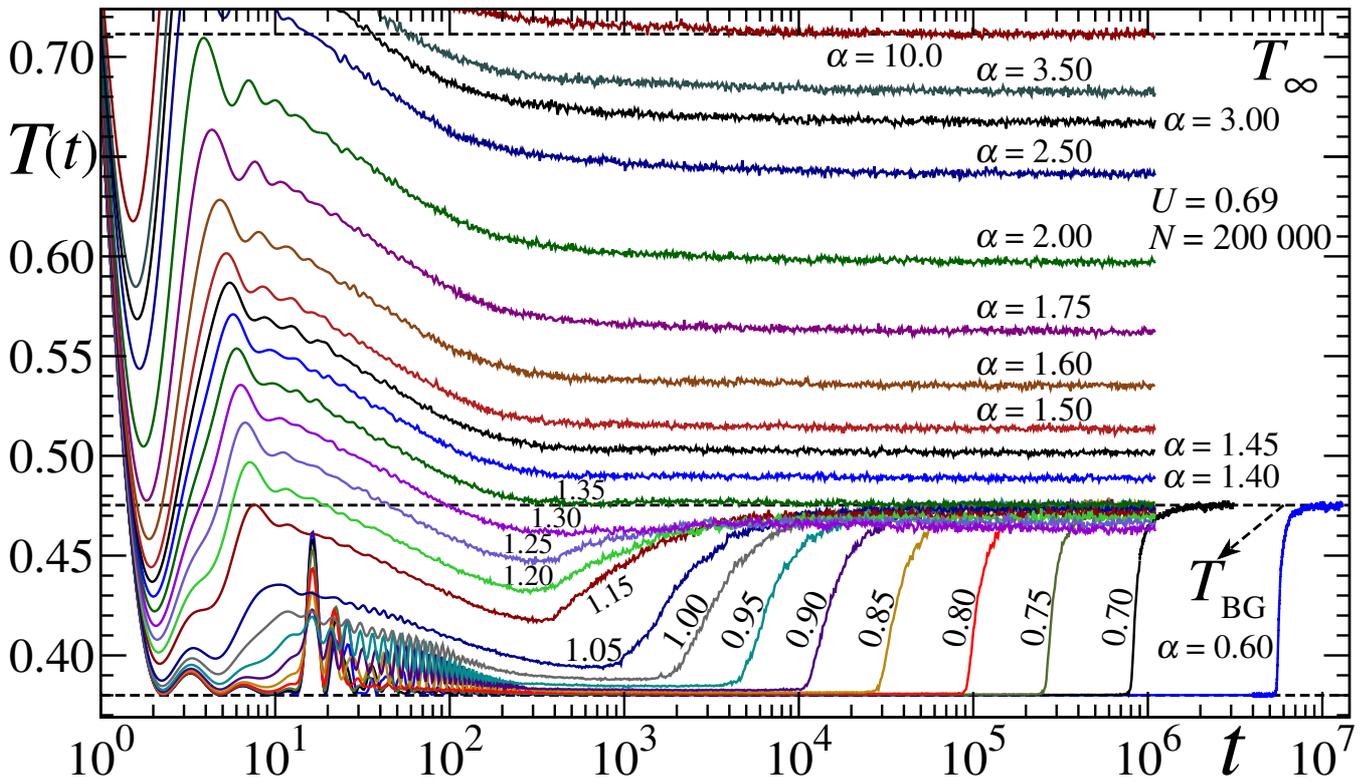


Fig. 4.3: Evolução da temperatura cinética para $(U, N) = (0.69, 200\,000)$ e diversos α 's entre $\alpha \in [0.6, 10.0]$. Para $\alpha \gtrsim 1$, o estado quase estacionário (QSS) praticamente não é mais detectado, mesmo para este valor de N , que é bastante grande. Conforme α aumenta, $T(t)$ abandona a temperatura canônica $T_{BG} \approx 0.475$, do modelo com $0 \leq \alpha < 1$, e aproxima-se da solução do modelo com $\alpha \rightarrow \infty$, $T_\infty \approx 0.711$. Nesta região intermediária entre $1 \leq \alpha < \infty$, para a qual não conhecemos solução analítica, um resultado curioso emerge das simulações: $T(t)$ estabiliza abaixo de T_{BG} no intervalo $1.0 < \alpha \lesssim 1.35$, volta a coincidir com T_{BG} em $\alpha \approx 1.35$, para daí então seguir em direção a T_∞ . Este comportamento pode ser visto claramente na Fig. 4.8 mais adiante, onde médias temporais de $T(t)$ após o QSS sobre várias destas realizações são apresentadas.

tendidos como realizações numéricas com condição inicial de mesma estrutura, mesmos parâmetros simulacionais, mesmos valores de (α, U, N) , porém iniciando o gerador aleatório que determina a distribuição inicial dos momentos com uma semente diferente. Uma analogia possível: eventos distintos estão associados a microestados de um mesmo macroestado do sistema]. Afora a Fig. 4.2, em que a evolução de $M(t)$ é apresentada, nos deteremos adiante na análise apenas da temperatura cinética $T(t)$. Voltaremos a tratar da magnetização na Sec. 4.13, durante a discussão da distribuição dos ângulos. Notar, entretanto, que acompanhar $T(t)$ na região de longo alcance está intimamente associado a acompanhar $M(t)$, sobretudo quando $\alpha = 0$ e conseqüentemente $T(t) = 2E/N - [1 - M^2(t)]$, relação deduzida substituindo as Eqs. (4.5) e (4.7) na Hamiltoniana (4.1). Cumpre observar que comparamos médias temporais calculadas a energia fixa [microcanônico] com resultados analíticos a temperatura fixa [canônico]. Contudo, foi demonstrada a equivalência entre os ensembles no equilíbrio para o sistema (4.1) [para $\alpha = 0$ em [76, 77], para $\alpha < d$ em [39]; ver também o trabalho de revisão [65]].

4.4 Sobre o Estado Quase Estacionário (QSS)

Ao ser preparado com a condição inicial do tipo *water bag* descrita mais acima, o sistema, mesmo iniciando com $M = 1$, rapidamente atinge um estado de magnetização nula com temperatura cinética coincidindo com o prolongamento da solução analítica $T = 2U - 1$. Este comportamento é observado na região de longo alcance $0 \leq \alpha < 1$ e no intervalo $0.68 \lesssim U < U_c = 0.75$ [sombreado na Fig. 4.1]. Para energias compreendidas em $U \approx [0.50, 0.68]$, o estado quase estacionário continua existindo, no entanto, a temperatura abandona o prolongamento $T = 2U - 1$, a magnetização deixa de ser zero e a diferença entre resultados numéricos e curvas analíticas diminui à medida que a energia se aproxima de $U = 0.50$. Para energias abaixo de $U \approx 0.50$, os resultados numéricos e canônicos coincidem, e o QSS não é mais observado [este comportamento pode ser visto, *e.g.*, na Fig. 1 da Ref. [75]. Comportamento qualitativamente similar é exibido na Fig. 5.6, Pág. 79, do próximo capítulo, referente aos rotores de Heisenberg]. Particularmente no intervalo $U \approx [0.50, 0.68]$, a temperatura cinética durante o QSS decresce com o aumento da energia, característica de calor específico negativo, um fenômeno estritamente microcanônico [ver Ref. [78] e citações; argumentos indicando a possibilidade de calor específico negativo também no ensemble canônico foram dados na Ref. [79]].

Diante dos resultados analíticos que demonstram a equivalência entre os ensembles, a presença de uma região de calor específico negativo é entendida como um fenômeno de não equilíbrio. Para o caso particular $\alpha = 0$, a duração t_{QSS} do estado quase estacionário em função do tamanho N do sistema tem sido investigada há alguns anos. Dependendo da condição inicial adotada, diferentes escalamentos foram observados, tais como $t_{\text{QSS}} \sim N$ [80, 81] [sob condições iniciais idênticas às daqui], $t_{\text{QSS}} \sim N^{1.7}$ [82, 83], mais recentemente $t_{\text{QSS}} \sim N^2$ [84, 85], ou mesmo exponencial [83]. Estes resultados numéricos indicam que o limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$ e o temporal $t \rightarrow \infty$ não comutam: caso o limite $N \rightarrow \infty$ seja tomado primeiro, o sistema *possivelmente* permanecerá no QSS para sempre, encará-lo então como um estado termodinâmico final do modelo talvez seja uma abordagem relevante. É prudente enfatizar a palavra *possivelmente* porque lidamos com evidências numéricas, conquanto bastante confiáveis, e não se pode afirmar que o sistema permanecerá de fato no QSS eternamente, jamais transitando para o estado caracterizado pelos valores de T e M preditos pela termoestatística de Boltzmann-Gibbs. Encarar o estado quase estacionário como um estado final efetivo, e não apenas como uma fase transiente de não equilíbrio, pode ter como consequência uma reavaliação dos resultados que indicam a equivalência entre os ensembles, além de levantar questões relacionadas a quebra de ergodicidade, uma vez que durante o QSS médias temporais das grandezas dinâmicas $T(t)$ e $M(t)$ não concordam com os resultados canônicos. O estado quase estacionário é um tema muito rico e nada trivial, a busca de seu entendimento tem mobilizado diversos autores, dentre os quais Chavanis & Campa [66, 86], Ettoumi & Firpo [87], Rocha, Figueiredo *et al.* [84, 85] [ver também os trabalhos de revisão [65, 88]].

A conexão entre o sistema (4.1) e a mecânica estatística não extensiva, para além da discussão formal sobre extensividade feita no Cap. 3 e no trabalho que introduziu o modelo [50], se deu primeiramente nas Refs. [81, 89], quando foi verificado numericamente que a distribuição de velocidades durante o QSS poderia ser descrita por uma q -gaussiana e não, como já se sabia [80, 90], por uma Maxwelliana. Entretanto, os resultados que nortearam o presente trabalho surgiram alguns anos

mais tarde e se basearam numa estratégia diferente, diretamente conectada ao Teorema do Limite Central (CLT). Pluchino, Rapisarda & Tsallis mostraram [91, 92] que robustas q -gaussianas eram observadas caso a distribuição de velocidades fosse construída a partir da soma do momento $p_i(t)$ ao longo do tempo, ou seja, a partir de médias temporais, como detalhado adiante. As q -gaussianas foram observadas durante o QSS, porém em apenas uma de suas *classes*, outra sutileza revelada nas simulações sobre a qual a próxima seção é dedicada.

4.4.1 Classes de QSS's

Estudando o modelo com $\alpha = 0$ (HMF), focando a energia $U = 0.69$ e iniciando com uma configuração do tipo *water bag* de magnetização $M = 1$, Pluchino[¶] *et al.* identificaram [91, 92], ao acompanhar a evolução temporal da temperatura cinética $T(t)$, que o sistema poderia evoluir durante o QSS de três maneiras distintas, que foram chamadas de classes 1, 2 e 3, como ilustra a Fig. 4.4. Esses resultados emergem de simulações sob as mesmas configurações iniciais e são aleatórios: variando a semente do gerador aleatório que define a distribuição dos momentos, a fim de produzir eventos distintos, o sistema evolui de forma imprevisível segundo uma das três classes. Aumentando o tamanho N contudo, a frequência de ocorrência dos eventos das classes 2 e 3 supera a da classe 1.

Os autores das Refs. [91, 92] mostraram que distribuições de velocidades construídas com a soma temporal do momento $p_i(t)$ durante o estado quase estacionário eram bem descritas por q -gaussianas caso o QSS fosse da classe 1. Eventos das classes 2 e 3 resultam, respectivamente, em distribuições de perfil mal definido ou aproximadamente Gaussiano, suficiente para se concluir que, dependendo do tipo de evolução dinâmica seguida pelo sistema, há um distanciamento do comportamento do Teorema Central do Limite, que estabelece uma Gaussiana como atrator. Quando lidamos com sistemas Hamiltonianos como o (4.1) e realizamos somas de variáveis dinâmicas ao longo do tempo, estamos calculando médias temporais. O fato das distribuições construídas a partir de somas diferirem daquelas obtidas em um único instante, ou por meio de média sobre vários eventos, mais próximo de uma média de ensemble, sugere que podemos estar diante de outro indício de quebra de ergodicidade, daí o título de [91], ainda mais após ser verificado [3] que distribuições de velocidades não Maxwellianas são observadas mesmo após o QSS. Os resultados e conclusões dos trabalhos [91, 92] geraram interessante debate [94–96] e são discutidos de forma ampla no Cap. 5 da Ref. [10].

O principal objetivo do trabalho [3], no qual o presente capítulo é baseado, foi estender os resultados de Pluchino *et al.* [91, 92] em duas direções: verificar que o ajuste q -gaussiano da distribuição de velocidades melhora à medida que o tamanho N do sistema aumenta, e verificar que essa distribuição abandona o formato q -gaussiano e converge para o Gaussiano conforme aumentamos o parâmetro α [e consequentemente nos aproximamos de uma interação de curto alcance]. Não é necessário construir distribuições durante o QSS, terceira conclusão obtida em [3], porque mesmo após $T(t)$ [e $M(t)$] alcançar o valor canônico T_{BG} , elas permanecem exibindo o formato q -gaussiano. A distinção entre classes de eventos torna-se então pouco importante para este propósito: pode-se aguardar o sistema atingir o *equilíbrio* e calcular as distribuições a partir deste instante, independentemente da classe de QSS previamente seguida pela realização numérica — procedimento muito

[¶]A. Pluchino produziu inúmeros trabalhos sobre o modelo HMF. Compilação de seus resultados até o ano de 2005 pode ser acessada em sua Tese de Doutorado [93].

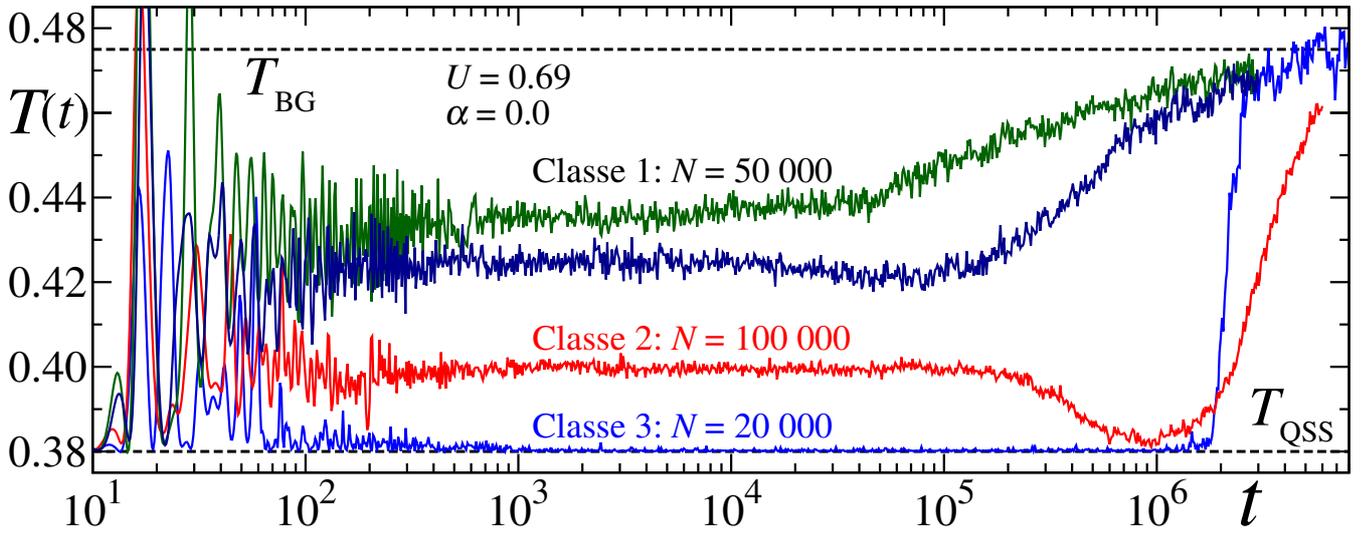


Fig. 4.4: Classes de estados quase estacionários (QSS's) obtidas em simulações sob mesmas condições iniciais. Distribuições de velocidades construídas utilizando somas do momento $p_i(t)$ ao longo do tempo *durante* o QSS apresentam formato q -gaussiano *apenas* em eventos da classe 1. Conforme o tamanho do sistema N aumenta, os eventos desta classe tornam-se raros, prevalecendo os das classes 2 e 3 [levantamento estatístico mostrando a frequência de ocorrência de cada classe foi realizado na Ref. [92]]. Os dois eventos da classe 1 aqui apresentados, com $N = 50\,000$, são difíceis de ser capturados numa simulação [foram obtidos após 40 realizações]. Eventos da classe 3 apresentam magnetização nula no QSS, com temperatura cinética acompanhando o prolongamento $T_{\text{QSS}} = 2U - 1 = 0.38$. Na Fig. 4.3 mais acima, para $N = 200\,000$, apenas eventos da classe 3 são exibidos.

vantajoso, dado que eventos da classe 1 são extremamente raros para N grande.

A estratégia de construir distribuições de probabilidades a partir da soma de variáveis dinâmicas ao longo do tempo, ou a partir de seguidas iterações de um mapa, tem sido utilizada em trabalhos relacionados à mecânica estatística não extensiva em mais de uma ocasião. Para sistemas Hamiltonianos, além dos resultados envolvendo o modelo α -XY, resultados equivalentes foram observados com uma versão generalizada da cadeia FPU na Ref. [97]; trabalhos recentes com mapas [22–26], modelos probabilísticos [98–100], dados econômicos de mercados financeiros [101, 102] e *random walk* [103, 104] também estão disponíveis [diversos outros, até o ano de 2009, são discutidos nos Caps. 5 e 7 de [10]]. Construir distribuições de probabilidades por meio de somas significa seguir a receita do Teorema do Limite Central. A possível estrutura matemática por trás da observação de q -gaussianas nessas distribuições pode estar ligada então a uma generalização particular do teorema, chamada de q -CLT, com relação direta com a mecânica estatística não extensiva; afinal, o papel das q -gaussianas nesta teoria é basicamente o mesmo das Gaussianas na mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs. A generalização q -CLT é tratada brevemente na próxima seção.

4.5 q -Generalização do Teorema do Limite Central

O Teorema do Limite Central (CLT) declara que uma sequência de variáveis aleatórias independentes $x_i(k)$'s, $k = 1, 2, \dots, n$, todas de média nula, variância finita e identicamente distribuídas, tem como atrator da soma:

$$\bar{x}_i = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x_i(k) \quad (4.8)$$

uma distribuição Gaussiana no limite $n \rightarrow \infty$:

$$P(\bar{x}_i) = P_0 e^{-b\bar{x}_i^2}$$

A convergência para a Gaussiana ocorre independentemente do formato da distribuição das variáveis $x_i(k)$'s, que pode ser arbitrário dentro da exigência de variância finita. Sob condições adequadas, o teorema permanece válido mesmo quando a distribuição não é comum, e em alguns casos particulares, mesmo com variância infinita [Feller [105], principalmente Cap. 8], embora esta última situação se enquadre mais comumente na versão generalizada do teorema, na qual a soma (4.8) tende para distribuições de Lévy [Zolotarev & Uchaikin [106], Cap. 2, e suas referências]. Uma ilustração numérica do teorema construída com variáveis aleatórias de variância finita, independentes e identicamente distribuídas é exibida na Fig. 4.5. Apesar do teorema exigir o limite $n \rightarrow \infty$, a convergência para o formato Gaussiano ocorre rapidamente neste caso [$n \lesssim 100$]. Para o exemplo da Fig. 4.5, as variáveis aleatórias, sorteadas de uma distribuição uniforme, foram obtidas artificialmente por meio de um gerador [pseudo] aleatório capaz de produzir uma sequência de números estatisticamente independentes de grande período. Para sistemas físicos, a exigência de independência das variáveis $x_i(k)$'s é geralmente bastante restritiva. É cumprida no caso do gás ideal, identificando $x_i(k)$ com o momento p_i da partícula i no instante k , mas deixa de ser quando há interação. Entretanto, para determinadas variáveis aleatórias não completamente independentes, normalmente classificadas como *fracamente dependentes* [no sentido em que a correlação $\langle x_i(t)x_i(t + \tau) \rangle$ se fatora suficientemente rápido com τ], a distribuição Gaussiana permanece sendo o atrator da soma (4.8). Não existe um teorema do limite central que trate de forma geral problemas envolvendo variáveis arbitrariamente correlacionadas[¶], normalmente cada caso é avaliado separadamente, um deles é discutido a seguir.

O objetivo da generalização do Teorema do Limite Central q -CLT é lidar com a soma de variáveis aleatórias fortemente correlacionadas. Esta generalização declara que uma sequência de variáveis aleatórias $x_i(k)$'s, $k = 1, 2, \dots, n$, identicamente distribuídas e correlacionadas de uma maneira especial, tem como atrator da soma (4.8) uma q -gaussiana no limite $n \rightarrow \infty$:

$$P(\bar{x}_i) = P_0 e_q^{-b\bar{x}_i^2} = P_0 [1 - b(1 - q)\bar{x}_i^2]^{\frac{1}{1-q}}$$

As variáveis $x_i(k)$'s podem ou não ter média nula e variância finita não é uma exigência [os momentos

[¶]Muitas vezes o Teorema do Limite Central é tratado de forma bastante objetiva, e também completa, abordando suas generalizações, na literatura de finanças direcionada a físicos, como no Cap. 2 de Bouchaud & Potters [107].

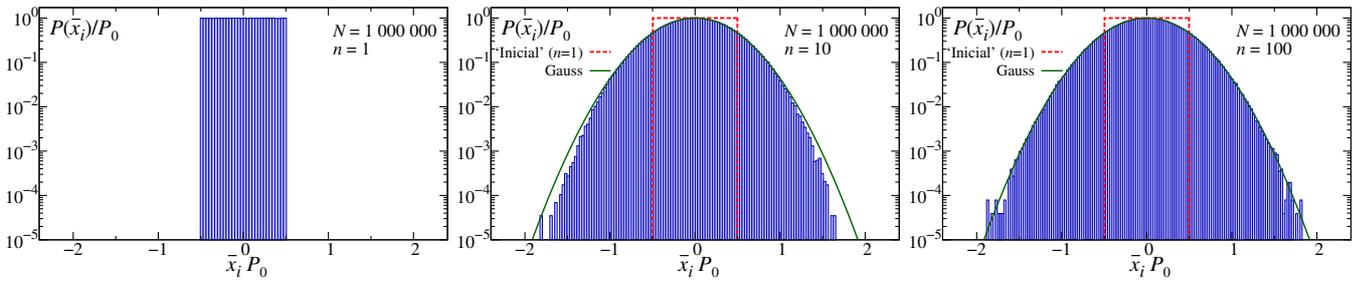


Fig. 4.5: Ilustração do Teorema Central do Limite (CLT) para variáveis aleatórias sorteadas de uma distribuição uniformemente distribuída no intervalo $[-1, 1]$. A distribuição uniforme é representada na figura da esquerda e foi construída com $N = 1\,000\,000$ de números. No meio, temos a distribuição que resulta da soma (4.8) considerando $n = 10$, e, à direita, a distribuição considerando $n = 100$. Como se pode observar [a linha cheia é uma Gaussiana, a ordenada é logarítmica], embora o teorema exija o limite $n \rightarrow \infty$, na prática a convergência é rápida sob estas condições [o gerador aleatório utilizado é conhecido como *Mersenne Twister* [111]]. Para comparações futuras, $N = 1\,000\,000$ é o maior valor empregado nas simulações do sistema (4.1), e as distribuições de velocidades foram construídas tipicamente com $n = 10^5$.

relevantes na discussão do q -CLT são momentos generalizados, denominados q -momentos, definidos mais à frente na Sec. 4.7 durante a discussão da q -kurtosis]. A correlação especial entre as variáveis aleatórias capaz de levar a soma (4.8) a uma q -gaussiana recebe o nome de q -independência, cuja abordagem exige uma sofisticação matemática além deste trabalho^{‡‡}. O desenvolvimento formal da generalização q -CLT é um tema em andamento, progressos recentes são mencionados no próximo parágrafo.

A tese da generalização q -CLT foi conjecturada por Tsallis em 2005 na Ref. [112], um trabalho recheado de motivações técnicas e analogias com os teoremas conhecidos com a finalidade de inspirar *a mathematician the way to prove it*. Esse artigo resultou em muitos desdobramentos[¶], e o teorema foi parcialmente provado por Umarov, Tsallis & Steinberg em 2008 [114]. A demonstração não se mostrou geral porque a q -generalização da transformada de Fourier, ferramenta empregada nessa demonstração, não é univocamente determinada para qualquer função, como Hilhorst [115] detectou. Esta degenerescência foi enfrentada por Jáuregui *et al.* [109, 110] e Plastino & Rocca [116, 117] que contornaram a não unicidade da q -transformada de Fourier adicionando informações suplementares — a inclusão desses novos resultados ao teorema q -CLT a fim de torná-lo geral é uma questão em discussão contudo. A tese proposta em [112] também foi abordada por outros ângulos: conclusões que a sustentam sem recorrer à transformada de Fourier generalizada foram obtidas em [118–120].

Na próxima seção apresentaremos distribuições de velocidades de partícula única construídas com somas análogas à (4.8) que são bem ajustadas por q -gaussianas. Embora sem um tratamento

^{‡‡}A função densidade de probabilidade (FDP) conjunta de duas variáveis aleatórias independentes x_1 e x_2 se fatora [$P(x_1, x_2) = P(x_1)P(x_2)$], propriedade que leva a transformada de Fourier de $P(y)$, FDP associada à variável aleatória soma $y = x_1 + x_2$, a se fatorar também: $\mathcal{F}\{P(y)\} = \mathcal{F}\{P(x_1)\}\mathcal{F}\{P(x_2)\}$. Este resultado é o coração de uma das demonstrações do CLT convencional e não se repete quando há correlação. Dizemos que duas variáveis aleatórias são q -independentes quando a igualdade $\mathcal{F}_q\{P(y)\} = \mathcal{F}_q\{P(x_1)\} \otimes_q \mathcal{F}_q\{P(x_2)\}$ é satisfeita. O símbolo \otimes_q representa o q -produto [$x \otimes_q y = [x^{1-q} + y^{1-q} - 1]^{1/1-q}$] e \mathcal{F}_q representa a q -generalização da transformada de Fourier [$\mathcal{F}_q\{P(y)\} = \int dy \exp_q[i\omega y] \otimes_q P(y)$]. A q -transformada de Fourier quando aplicada a uma q -gaussiana resulta em uma Q -gaussiana, de forma análoga à transformada de Fourier tradicional, que leva Gaussianas em Gaussianas. q -independência significa quase sempre independência usual quando $q = 1$ e um tipo particular de correlação quando $q \neq 1$. O Cap. 4 de [10] aborda os avanços nestas questões até 2009, referências mais recentes são citadas no texto; Max Jáuregui dedicou particular atenção à q -transformada de Fourier nos últimos anos [108–110].

[¶]Dentre os quais se destaca a generalização das distribuições de Lévy discutida na Ref. [113].

matemático definitivo, acreditamos que esses resultados sejam manifestações numéricas de uma possível versão generalizada do Teorema do Limite Central do tipo q -CLT que acabamos de discutir.

4.6 Distribuição de Velocidades

O principal objetivo deste capítulo é a análise das distribuições de velocidades construídas segundo a receita do Teorema do Limite Central, quer dizer, construídas com médias temporais dos momentos p_i 's. Aqui nesta seção, o comportamento dessas distribuições é investigado em função do parâmetro α , responsável por regular o alcance da interação no sistema (4.1).

Os histogramas apresentados a seguir foram construídos com a soma:

$$\bar{p}_i = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n p_i(k\tau) \quad \text{para} \quad i = 1, 2, 3, \dots, N \quad (4.9)$$

Fixando-se o intervalo τ entre medições sucessivas do momento p_i de cada rotor ao longo do tempo, a média temporal compreende o período $\Delta t = t_{\max} - t_{\min} = n\tau$ [τ não deve ser confundido com o passo de integração do algoritmo, o seu menor valor possível coincide com o passo de integração]. As médias temporais foram calculadas *após* o estado quase estacionário (QSS), quando este é observado [$0 \leq \alpha \lesssim 1$], *i.e.*, após a transição do sistema para o regime no qual a temperatura $T(t)$ [e a magnetização $M(t)$] coincide com a predição analítica da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs [ver Figs. 4.2 e 4.3], e considerando-se sempre uma única realização numérica do sistema (4.1) [histogramas estatisticamente significativos foram obtidos empregando-se valores suficientemente grandes de N nas simulações].

Mesmo em trabalhos que haviam identificado q -gaussianas como distribuição de velocidades [91], a expectativa sobre o formato dessas distribuições era a de que, uma vez atravessado o QSS, o sistema adotaria uma distribuição Boltzmanniana no espaço de fases e conseqüentemente exibiria uma Maxwelliana como distribuição de velocidades, quer fosse calculada por meio de média temporal ou de ensemble. Entretanto, os resultados a seguir revelam um cenário mais rico, no qual robustas q -gaussianas [ou ao menos distribuições numericamente muito próximas a elas] surgem mesmo em intervalos em que a temperatura cinética *coincide* com os resultados canônicos. Este comportamento é observado a energias abaixo e acima da crítica e em toda região de longo alcance $\alpha \leq 1$. Adentrando na região de curto alcance $\alpha > 1$, as distribuições aproximam-se de Gaussianas, podendo ser razoavelmente ajustadas por q -gaussianas até $\alpha \approx 1.6$. Embora o ajuste q -gaussiano seja melhor para energias abaixo da crítica $U_c = 3/4$, aqui focamos em $U = 0.69 < U_c$ principalmente para dar continuidade e complementar trabalhos anteriores [91, 92, 94, 95]; resultados similares foram observados até $U = 0.50$, mas uma análise sistemática com $U \neq 0.69$ não foi realizada [distribuições para $U > U_c$ serão apresentadas na Sec. 4.11 mais à frente].

O ponto a ser destacado sobre a distribuição de velocidades pode ser resumido pela Fig. 4.6. Nela observamos distribuições obtidas por meio da Eq. (4.9), com a soma abrangendo uma região de temperatura cinética $T(t)$ no regime estacionário de equilíbrio [flutuando sobre o resultado canônico T_{BG} quando este é conhecido, *insets* nas figuras], considerando-se dois valores para o parâmetro α : $\alpha = 0.90$ [longo alcance] e $\alpha = 2.0$ [curto alcance]. O período sobre o qual cada média foi calculada e o intervalo entre medições sucessivas são idênticos, $\Delta t = 300\,000$ e $\tau = 1.0$

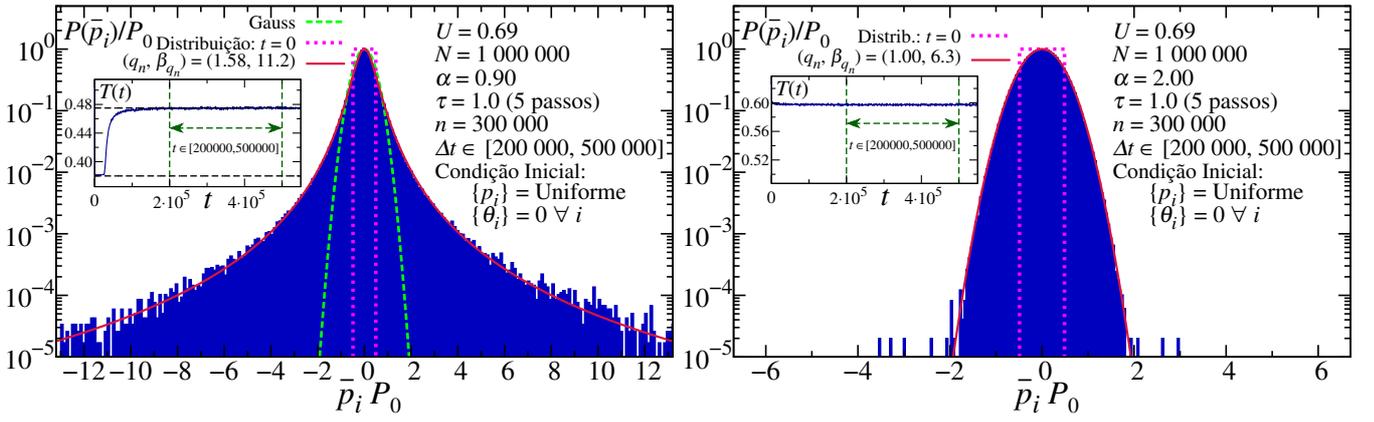


Fig. 4.6: Distribuições de velocidades da Hamiltoniana (4.1) construídas com a soma (4.9) abrangendo o período $\Delta t \in [200\,000, 500\,000]$ [regiões delimitadas nos *insets*], para $(U, N) = (0.69, 1\,000\,000)$. O intervalo entre medições sucessivas é $\tau = 1.0$, resultando em $n = 300\,000$ medições no total. Todas as condições e demais parâmetros simulacionais são idênticos em ambas as figuras, exceto α . Para $\alpha = 0.90$ [interação de longo alcance, figura à esquerda], a distribuição é bem ajustada por uma q -gaussiana com $q_n = 1.58$ [n responde por *numérico*]. Quando $\alpha = 2.00$ [interação de curto alcance, à direita], as simulações revelam uma Gaussiana [$q_n = 1.0$], como esperado. As médias temporais foram calculadas em regiões com temperatura cinética no regime estacionário, após o QSS quando $\alpha = 0.90$, após $T(t)$ alcançar o resultado canônico $T_{BG} \approx 0.475$ [linha tracejada horizontal superior no *inset*], empregando uma única realização numérica para cada valor de α . Os valores $(q_n, \beta_{q_n}) = (1.58, 11.2)$ associados ao histograma com $\alpha = 0.90$ estão representados como círculos abertos [vermelhos] na Fig. 4.8 mais à frente.

respectivamente, perfazendo um total de $n = 300\,000$ medições em ambos os casos; todos os demais parâmetros simulacionais também são idênticos. O histograma correspondente à interação de curto alcance, muito bem ajustado por uma Gaussiana [figura à direita], é perfeitamente descrito pela termoestatística usual [sistema Hamiltoniano de curto alcance, no equilíbrio, assim, distribuição Maxwelliana de velocidades], conclusão que não se estende ao exemplo de longo alcance, no qual um bom ajuste é oferecido por uma q -gaussiana com $q_n = 1.58$ [o índice n apenas realça a origem numérica de q_n].

Os resultados exibidos na Fig. 4.6 exprimem de modo bastante claro como o alcance da interação influencia a termoestatística do modelo (4.1). Reforçamos que as médias temporais foram avaliadas após o QSS quando $\alpha = 0.90$ e após a temperatura cinética estabilizar quando $\alpha = 2.0$, utilizando uma única realização em cada caso. Este mesmo procedimento é repetido na próxima seção, dedicada a uma análise numérica detalhada do comportamento da distribuição de velocidades em função do parâmetro α [o comportamento também durante o QSS, a influência do número de medições n e do intervalo τ serão analisados mais à frente, a partir da Sec. 4.8].

4.6.1 Comportamento de q em Função de α

A Fig. 4.6 apresenta distribuições obtidas em simulações com $N = 1\,000\,000$, um valor bastante grande. Simulações com grandes valores de N , capazes de fornecer histogramas estatisticamente ricos, são custosos computacionalmente. Para uma análise sistemática em função do parâmetro α , no intervalo $\alpha > 0.50$, utilizamos $N = 200\,000$, um valor menor porém ainda grande. Conforme α diminui, a duração do estado quase estacionário aumenta [cf. Figs. 4.2 e 4.3]. Como as médias temporais foram calculadas sempre após o QSS, na região $\alpha \leq 0.50$ adotamos $N = 30\,000$ nas

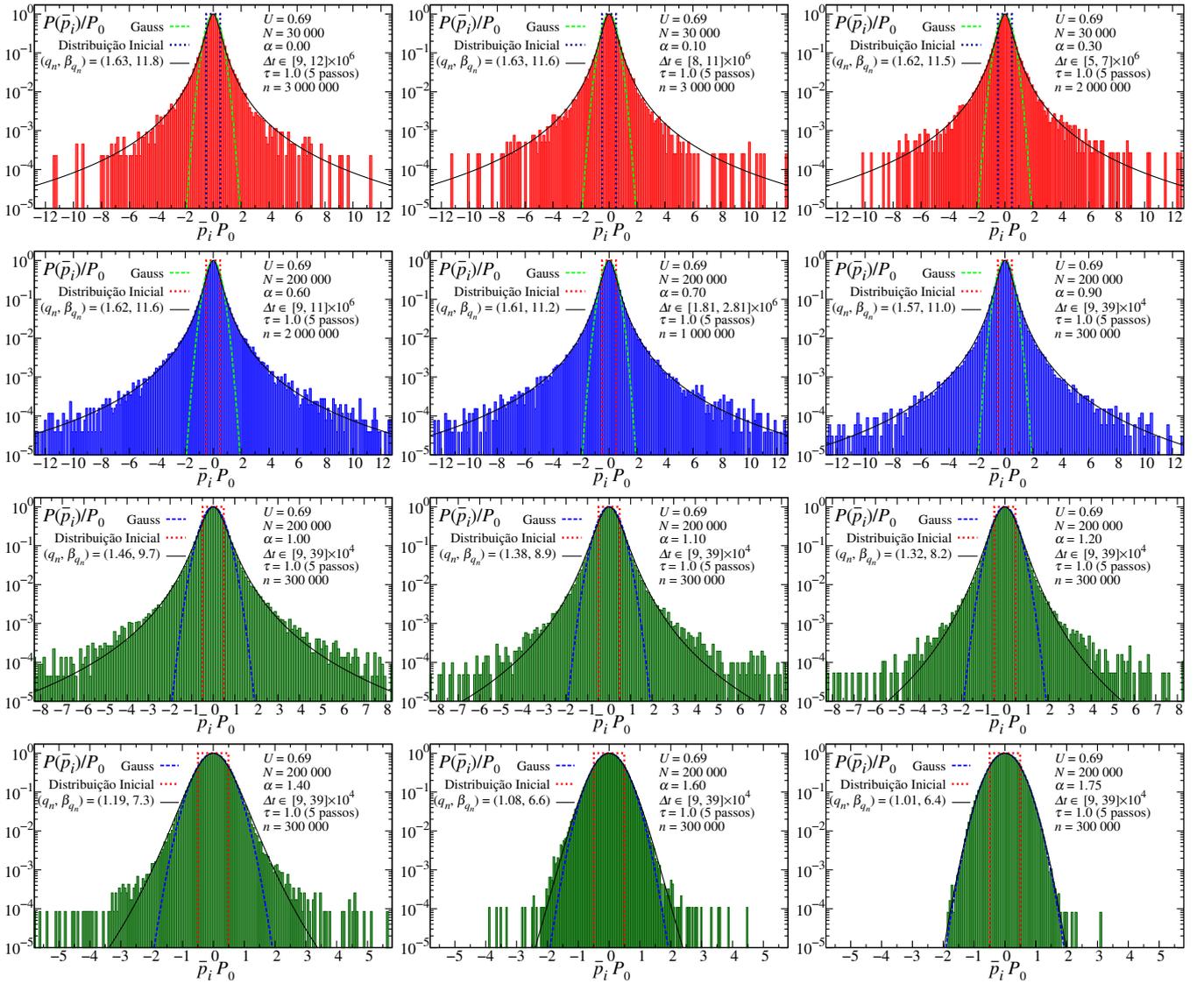


Fig. 4.7: Distribuições de velocidades para $U=0.69$ e α entre $\alpha \in [0.0, 1.75]$. O intervalo Δt sobre o qual cada média temporal foi calculada está indicado na respectiva figura, podendo ser comparado com as Figs. 4.2 e 4.3. O intervalo entre medições sucessivas é $\tau=1.0$ e o número mínimo de medições é $n=300\,000$. Na região de longo alcance até aproximadamente $\alpha \approx 0.90$, as distribuições são bem ajustadas por q -gaussianas com $q_n \approx 1.6$. Conforme α aumenta, há a convergência para uma Gaussiana, sendo $q_n=1$ alcançado em torno de $\alpha \approx 1.7$. Nos três histogramas mais acima, referentes a $\alpha=0.0, 0.1$ e 0.3 , obtidos com $N=30\,000$ [os demais foram com $N=200\,000$], a estatística é mais pobre, porém o formato da distribuição se manifesta. Na Fig. 4.8 a seguir estão reunidos os valores de q_n e β_{q_n} destes 12 histogramas em função de α .

simulações.

Seguindo o mesmo procedimento que resultou nas distribuições de velocidades da Fig. 4.6, simulações com diversos valores de α foram realizadas e as respectivas distribuições construídas. Histogramas para 12 valores crescentes de α são exibidos na Fig. 4.7, de $\alpha=0.00$ até $\alpha=1.75$. Na região de longo alcance $0 \leq \alpha \leq 1$, as distribuições são bem ajustadas por q -gaussianas, com um valor de q aproximadamente constante em torno de $q_n \approx 1.6$ no intervalo $\alpha \lesssim 0.90$, e um valor um pouco menor, em torno de $q_n \approx 1.5$, quando $\alpha \approx 1.0$. Entrando na região de curto alcance $\alpha > 1$, a convergência para uma Maxwelliana à medida que α aumenta torna-se evidente, com $q_n=1$ alcançado em torno de $\alpha \approx 1.7$ [na Fig. 4.8 está representado q_n contra α]. Simulações com $N=30\,000$ produzem histogramas mais pobres, com caldas ruidosas, ainda assim o formato das distribuições se manifesta

com razoável clareza, conforme os 3 histogramas mais acima na Fig. 4.7, correspondentes a $\alpha = 0.0, 0.1$ e 0.3 [os demais são com $N = 200\,000$]. A imprecisão no valor de q_n nestes casos é maior, mas os resultados são consistentes o suficiente para afastarmos a possibilidade de $q_n = 1$. Esses 12 histogramas da Fig. 4.7 foram construídos com o número de medições na Eq. (4.9) nunca inferior a $n = 300\,000$, e sempre com $\tau = 1.0$. O período $\Delta t = n\tau$ sobre o qual cada média temporal foi calculada está indicado nos gráficos e pode ser confrontado com as Figs. 4.2 e 4.3. Para os menores valores de α , esse período é maior, acarretando um número n de medições também maior. A definição de quão grande deve ser n é baseada na convergência da distribuição para o que seria, aparentemente [porque numérico], o seu formato final, como veremos na Sec. 4.8 mais à frente.

Os 12 ajustes da Fig. 4.7, agregado a outros tantos, estão reunidos na Fig. 4.8. Para cada α , encontram-se representados os respectivos q_n e β_{q_n} , oriundos do ajuste, e a temperatura, denotada por T_{kin} , correspondente à média temporal da temperatura cinética cobrindo intervalos onde $T(t)$ é estável, $T_{\text{kin}} = \langle T(t) \rangle_{\text{Tempo}} = \langle 2K(t)/N \rangle_{\text{Tempo}}$ pela Eq. (4.7), e sempre após o QSS quando este é observado [algumas dessas médias foram reportadas na Fig. 4.1 mais acima].

Analisando o comportamento de q_n , notamos que seu valor permanece em torno de $q_n \approx 1.6$ até aproximadamente $\alpha \lesssim 1.0$, porém mesmo avançando na região de curto alcance $\alpha > 1.0$, ao menos até $\alpha \gtrsim 1.6$, as distribuições não alcançam o formato Gaussiano esperado[¶], indício de que a natureza de longo alcance da interação persiste para além da fronteira $\alpha = 1.0$, resultado não intuitivo não imaginado inicialmente [conclusão similar foi obtida por outras vias em [121]]. Não se pode descartar, contudo, a possibilidade de que no limite $\Delta t = n\tau \rightarrow \infty$ a distribuição Maxwelliana típica do equilíbrio térmico seja eventualmente recuperada, tanto nesta região entre $1.0 < \alpha \lesssim 1.7$, como também em todo o intervalo de longo alcance $0 \leq \alpha \leq 1$; o que o presente trabalho garante é que o período para que isso ocorra pode ser muito grande [na Fig. 4.13 mais à frente é exibido um exemplo com $\alpha = 1.35$ e que mesmo com $n = 10^6$ o formato Gaussiano não é recuperado].

O comportamento de β_{q_n} é qualitativamente o mesmo de q_n : permanece aproximadamente constante até $\alpha \lesssim 1.0$ e então se aproxima do valor correspondente a uma distribuição Gaussiana. Como os ajustes foram sobre histogramas normalizados por seus valores máximos P_0 , graficamos β_{q_n} de maneira que o resultado canônico $T_\infty \approx 0.711$ fosse alcançado quando a distribuição atingisse o formato Gaussiano; uma comparação quantitativa com T_{kin} não é imediata^{‡‡}, demandaria o “desdobramento” da soma (4.9). Na mecânica estatística não extensiva, o parâmetro β_q não deve ser associado automaticamente à temperatura. Associá-lo a uma *temperatura efetiva*, não necessariamente ligada à temperatura cinética, refletindo, no presente caso, a largura da distribuição de velocidades, surge como uma possibilidade. A coexistência de mais de uma temperatura em um único sistema não é novidade. Foi, por exemplo, brevemente discutida no contexto de plasmas na Ref. [5], numericamente verificada em um gás resfriado em cavidade óptica na Ref. [122] [desta-

[¶]Trabalhando com histogramas normalizados pelos seus respectivos valores máximos $P_0 = P(0, \beta)$, uma distribuição Gaussiana nas variáveis $x' = xP_0$ e $\beta' = \beta/P_0^2$, $G(x', \beta') = P(x, \beta)/P(0, \beta) = \exp[-\beta'x'^2/2]$, terá sempre largura $\beta' = 1/T' = 2\pi$. Para o caso de uma q -gaussiana, há dependência de q : $\beta'_q = \frac{2\pi}{q-1} \left[\Gamma\left(\frac{3-q}{2(1-q)}\right) \right]^2 \Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)^{-2}$, resultado correspondente ao intervalo $1 < q < 3$.

^{‡‡}Uma distribuição construída com a soma (4.8) cobrindo variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas com variância σ^2 e média nula, tem, pelo CLT Gaussiano convencional, variância $\sigma_n^2 = \sigma^2/n$. Este resultado permite determinar σ^2 para qualquer n suficientemente grande. Relação analítica equivalente é desconhecida no nosso caso para α arbitrário, a anterior é recuperada apenas quando $\alpha \gg 1$ e $\tau \gg 1$ e as correlações perdem importância.

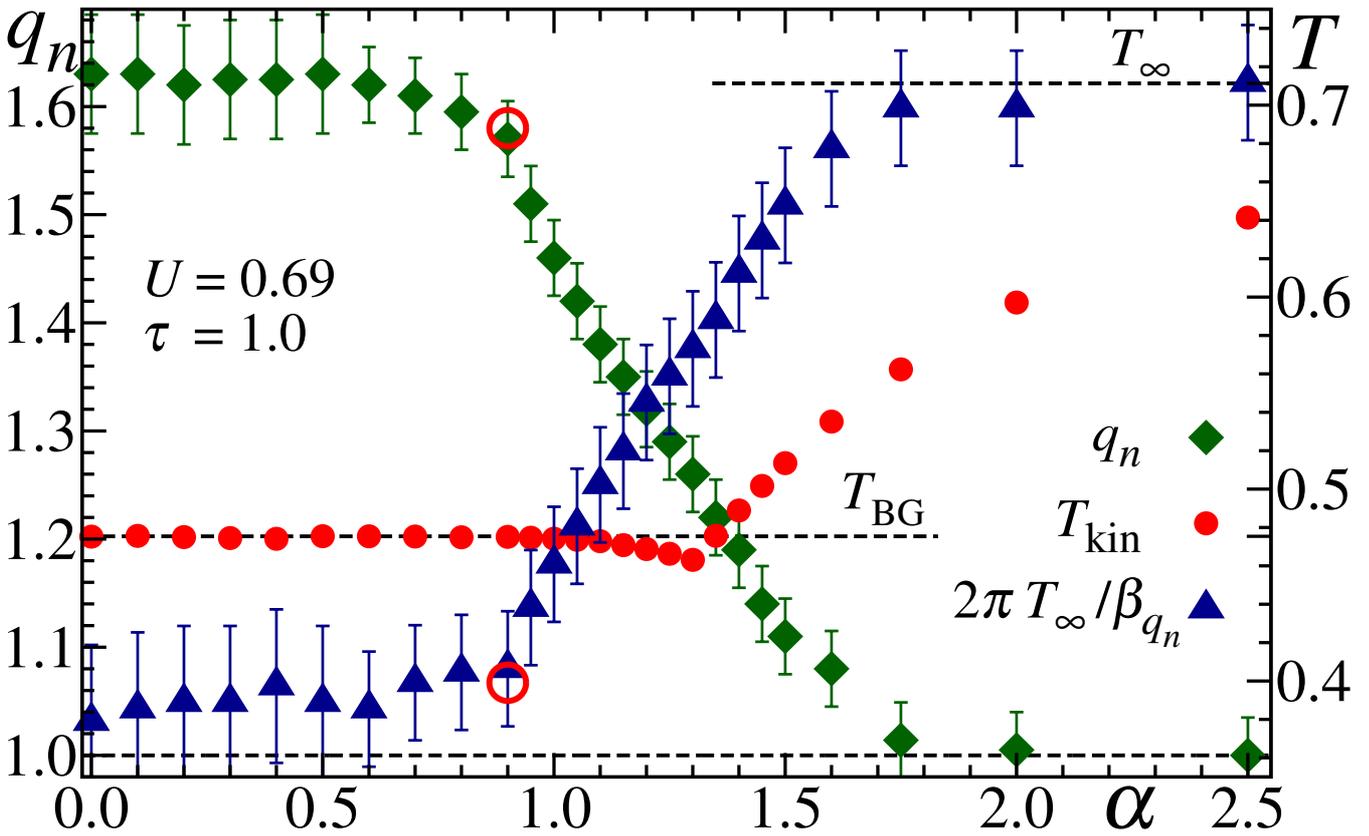


Fig. 4.8: Comportamento de q_n e β_{q_n} em função de α para $(U, \tau) = (0.69, 1.0)$. T_{kin} corresponde à média temporal da temperatura cinética, $T_{\text{kin}} = \langle T(t) \rangle_{\text{Tempo}} = \langle 2K(t)/N \rangle_{\text{Tempo}}$. Até $\alpha \gtrsim 1$, T_{kin} coincide com o resultado canônico $T_{\text{BG}} \approx 0.475$ [associado ao modelo com $0 \leq \alpha < 1$], depois segue se aproximando de $T_\infty \approx 0.711$ [associado a $\alpha \rightarrow \infty$], sendo este valor alcançado em torno de $\alpha \lesssim 10.0$ [cf. Figs. 4.2 e 4.3]. Nesta região intermediária entre $1.0 < \alpha < \infty$ desconhecemos solução analítica; notar que entre $1.0 < \alpha \lesssim 1.35$, T_{kin} fica um pouco abaixo de T_{BG} . Os resultados para q_n e β_{q_n} vêm do ajuste de histogramas com $N = 30\,000$ se $\alpha \leq 0.5$ [barras de erro maiores] e $N = 200\,000$ se $\alpha \geq 0.6$ [12 deles estão na Fig. 4.7], construídos com um número de medições na Eq. (4.9) nunca inferior a $n = 300\,000$. Particularmente, os círculos abertos [vermelhos] correspondem à distribuição com $\alpha = 0.9$ da Fig. 4.6, construída com $N = 1\,000\,000$. Como podemos observar, deve-se avançar na região de curto alcance até aproximadamente $\alpha \approx 1.7$ para que $q_n = 1.0$ seja alcançado. Os valores de β_{q_n} foram escalados de modo que T_∞ fosse recuperado quando a distribuição atingisse o formato Gaussiano. Tanto as médias temporais dos momentos p_i 's que produziram os histogramas, quanto as que resultaram em T_{kin} , foram calculados em regiões com $T(t)$ estável, sempre após o QSS quando este é observado.

que para a Fig. 2], e tem tido papel central na série de trabalhos sobre vórtices empreendida por Nobre *et al.* iniciada em 2010 [29] em cujo mais recente desdobramento [123] é apresentado um ciclo equivalente ao de Carnot para a temperatura efetiva. Trata-se de tema riquíssimo[¶], com muitas implicações, mas, infelizmente, está [muito] além do objetivo principal deste capítulo, que é a análise do comportamento de q . Ademais, a expressão *largura da distribuição* é normalmente interpretada como a variância, possivelmente em virtude da ubiquidade de Gaussianas em fenômenos naturais. No entanto, o segundo momento de uma q -gaussiana não é finito se $q \geq 5/3 \approx 1.67$, e uma outra maneira de caracterizar a largura deve ser buscada[‡], uma delas é apresentada na Sec. 4.7 a seguir, durante a discussão da q -kurtosis.

[¶]No âmbito da física de altas energias, mas não apenas, levou Biró a indagar [124]: *Is There a Temperature?*

[‡]No caso da Lorentziana, que corresponde a uma q -gaussiana com $q = 2$, distribuição comum em óptica [125], usa-se a largura plena à meia altura (FWHM).

4.7 q -Kurtosis e Média de Escort

Para verificar a qualidade do ajuste q -gaussiano realizado nos histogramas da seção anterior, introduziremos uma conveniente q -generalização da kurtosis, a qual chamaremos de q -kurtosis. A kurtosis κ da variável aleatória x é definida como:

$$\kappa = \frac{1}{3} \frac{\langle x^4 \rangle}{\langle x^2 \rangle^2} \quad (4.10)$$

Para uma variável aleatória contínua descrita pela distribuição de probabilidade $P(x)$ normalizada, quer dizer, $\int dx P(x) = 1$, a equação anterior se escreve:

$$\kappa = \frac{1}{3} \frac{\int dx x^4 P(x)}{\left[\int dx x^2 P(x) \right]^2} \quad \text{pois:} \quad \langle x \rangle = \int dx x P(x)$$

Caso a variável aleatória x seja normalmente distribuída, a kurtosis será igual a $\kappa = 1$; com efeito:

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-x^2/2\sigma^2} \Rightarrow \begin{cases} \langle x^2 \rangle = \sigma^2 \\ \langle x^4 \rangle = 3\sigma^4 \end{cases} \Rightarrow \kappa = \frac{1}{3} \frac{\langle x^4 \rangle}{\langle x^2 \rangle^2} = 1$$

A kurtosis é uma medida quantitativa do formato da distribuição. Pelo fato de seu valor ser a unidade para uma distribuição Gaussiana, ela é muitas vezes usada como parâmetro de controle em simulações a fim de se verificar se determinado sistema atingiu o equilíbrio, quando, evidentemente, o equilíbrio é caracterizado por uma distribuição Gaussiana.

Agora, avaliemos a situação em que a distribuição de probabilidade (FDP) é uma q -gaussiana:

$$P_q(x) = A_q e_q^{-\beta x^2/2} = A_q [1 - (1-q)\beta x^2/2]^{1/(1-q)}$$

A q -gaussiana é normalizável no intervalo $q < 3$ com uma escolha adequada de A_q . No limite $q \rightarrow 1$, recaímos na Gaussiana convencional, cuja constante de normalização vale $A_1 = \sqrt{\beta/2\pi} = 1/\sqrt{2\pi\sigma^2}$. Para os demais valores de $q \neq 1$, pode-se mostrar que:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx P_q(x) = 1 \Rightarrow A_q = \begin{cases} \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} \frac{(3-q)\sqrt{1-q}}{2} \left[\Gamma\left(\frac{1}{1-q}\right) \right]^{-1} \Gamma\left(\frac{3-q}{2(1-q)}\right) & \text{se } q < 1 \\ \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} \sqrt{q-1} \left[\Gamma\left(\frac{3-q}{2(1-q)}\right) \right]^{-1} \Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right) & \text{se } 1 < q < 3 \end{cases}$$

Uma sutileza a ser considerada na dedução deste último resultado consiste em assumir $P_q(x) = 0$ sempre que $[1 - (1-q)\beta x^2/2] \leq 0$. Garantimos assim apenas solução nos reais quando $q < 1$ [ver também [126]]. Usando uma q -gaussiana normalizada como FDP, o segundo $\langle x^2 \rangle$ e o quarto $\langle x^4 \rangle$

momentos se escrevem:

$$P_q(x) = A_q e_q^{-\beta x^2/2} \Rightarrow \begin{cases} \langle x^2 \rangle = \frac{2}{\beta} \frac{1}{5-3q} \\ \langle x^4 \rangle = \left(\frac{2}{\beta}\right)^2 \frac{3}{(5-3q)(7-5q)} \end{cases} \quad (4.11)$$

Mesmo a q -gaussiana sendo normalizável para $q < 3$, o resultado (4.11) acima revela que o segundo momento $\langle x^2 \rangle$ diverge antes, em $q = 5/3 \approx 1.7$, e o quarto momento $\langle x^4 \rangle$ diverge em um valor de q ainda menor, em $q = 7/5 = 1.4$, que é também o local de divergência da kurtosis, que neste caso é dada por [ver Fig. 4.9]:

$$\kappa(q) = \frac{5-3q}{7-5q} \quad (\text{kurtosis para a FDP } q\text{-gaussiana}) \quad (4.12)$$

A kurtosis divergir para $q \geq 7/5$ significa que não é adequado utilizá-la para caracterizar nossos resultados numéricos, uma vez que obtivemos valores q_n para a distribuição de velocidades superiores a $7/5$ na região de longo alcance $0 \leq \alpha \leq 1$ [cf. Fig. 4.8]. Tal limitação pode ser contornada por meio da *média de escort*, ferramenta que tem se mostrado muito útil no formalismo da mecânica estatística não extensiva.

A introdução formal do conceito de média de escort, salvo engano, se deu em 1995 no trabalho de Beck & Schlögl [127, Cap. 9] com o objetivo de analisar distribuições de probabilidades “complicadas”, palavra dos autores, e tendo como motivação o estudo da conexão entre termoestatística, sistemas dinâmicos não lineares e fractais — sem nenhuma relação com a mecânica estatística não extensiva, embora a ideia tenha sido discretamente mencionada no marco inicial [9] da teoria[¶]. Pensemos no caso discreto pela clareza. Esta técnica consiste em partir do conjunto de probabilidades $\{p_i\}$, com $p_i \neq 0 \forall i$, e montar o conjunto associado $\{P_i\}$ da seguinte maneira [γ é um parâmetro real]:

$$p_i \longrightarrow P_i = \frac{p_i^\gamma}{\sum_{j=1} p_j^\gamma}$$

O cálculo do valor médio de uma grandeza \mathcal{A} se estende então ao novo conjunto $\{P_i\}$ como a média de escort $\langle \mathcal{A} \rangle_\gamma$:

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \sum_{i=1} A_i p_i \longrightarrow \langle \mathcal{A} \rangle_\gamma = \sum_{i=1} A_i P_i = \frac{\sum_{i=1} A_i p_i^\gamma}{\sum_{j=1} p_j^\gamma}$$

Voltemos à situação contínua. Adiantando que o parâmetro γ dependerá de q , o enésimo mo-

[¶]A conexão explícita entre média de escort e a mecânica estatística não extensiva ocorreria em 1998, no conhecido trabalho de Tsallis, Rênio & Plastino [27]. C. Beck, coautor em [127], introduziu também a superestatística [128], teoria com grande ligação com a q -estatística.

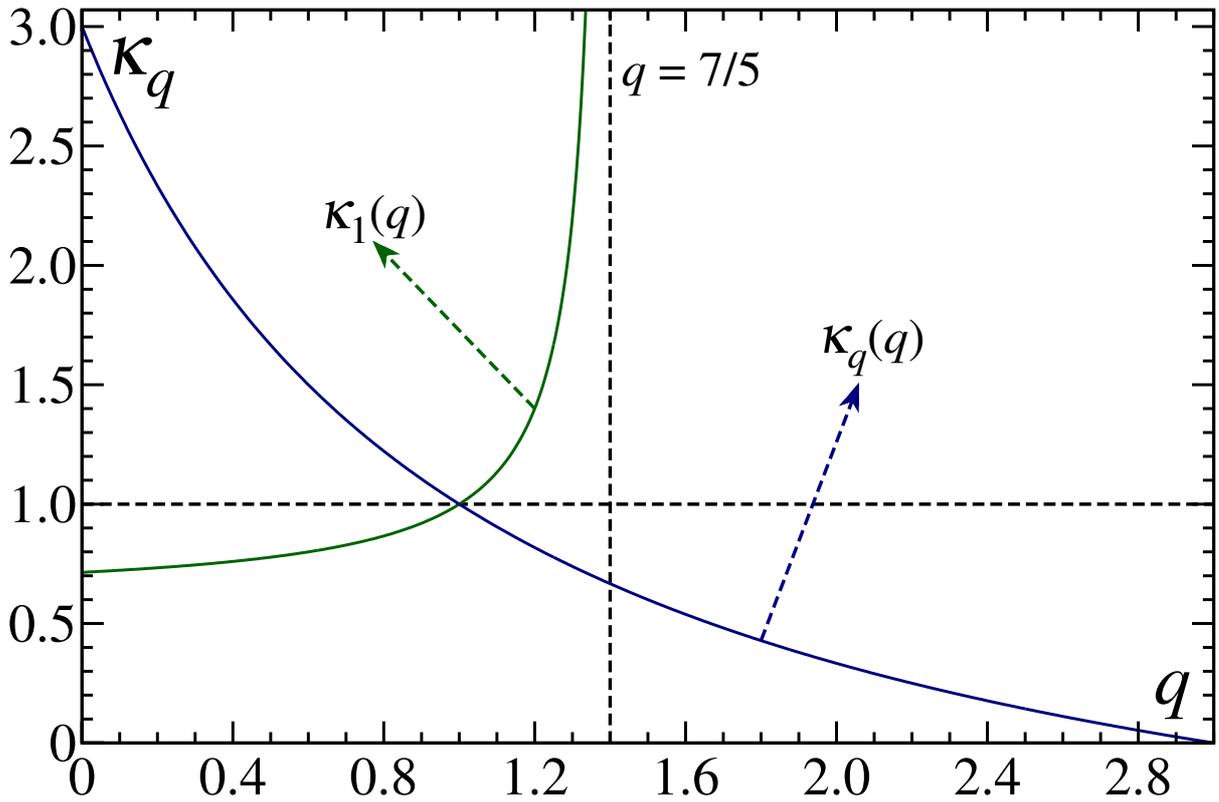


Fig. 4.9: Kurtosis convencional $\kappa_1(q)$ e q -kurtosis $\kappa_q(q)$ da distribuição q -gaussiana, Eqs. (4.12) e (4.15) respectivamente. A kurtosis $\kappa_1(q)$ diverge em $q = 7/5 = 1.4$ [linha tracejada vertical], não é, portanto, adequada para caracterizar a distribuição de velocidades do modelo α -XY no intervalo $0 \leq \alpha \leq 1$. Esta limitação é contornada com a introdução da q -kurtosis, livre de divergência na região de interesse.

mento calculado de acordo com o conceito de média de escort se escreve:

$$\langle x^n \rangle_{\gamma(q)} = \int dx x^n [P(x)]^{\gamma(q)} / \int dx [P(x)]^{\gamma(q)}$$

Como ocorre a escolha da função $\gamma(q)$? Resposta: baseada na divergência dos momentos generalizados $\langle x^n \rangle_{\gamma(q)}$, a qual, por sua vez, depende da densidade de probabilidade considerada. Quando a FDP é uma q -gaussiana $P_q(x)$, o segundo e quarto momentos usuais divergem em $q = 5/3$ e em $q = 7/5$ respectivamente [cf. Eq. (4.11)], ao passo que a própria FDP é normalizável até $q = 3$. Podemos entender intuitivamente esta divergência em $q = 3$ ao observar o comportamento assintótico da q -gaussiana para $x \rightarrow \infty$: $P_q(x) \sim 1/x^{2/(q-1)}$. A convergência de uma integração entre $(-\infty, +\infty)$ sobre uma lei de potência assim fica assegurada sempre que $2/(q-1) > 1$, ou: $q < 3$. Análise similar revela igualmente os valores máximos de q para que o segundo e o quarto momento convirjam. Empregando a média de escort, ganha-se a liberdade de modificar esses valores máximos com uma escolha adequada da função $\gamma(q)$, não apenas do segundo e quarto, mas do enésimo momento em geral. Seria interessante definir um único q a partir do qual qualquer momento de ordem n divirja. Como a própria densidade de probabilidade $P_q(x)$ perde sentido a partir de $q = 3$, é tentador elegê-lo como o limite superior de q e determinar a função $\gamma(q)$ de modo que as médias $\langle x^n \rangle_{\gamma(q)}$ sejam todas finitas até ele, qualquer que seja n . Esse será o procedimento adotado aqui. A igualdade no valor máximo de q é obtida exigindo-se que o comportamento assintótico do produto $x^n [P_q(x)]^{\gamma(q)}$ se iguale ao de $P_q(x)$, ou seja, exigindo-se que $x^n / x^{2\gamma(q)/(q-1)} = 1/x^{2/(q-1)}$, que resulta na seguinte

expressão para o parâmetro $\gamma(q)$:

$$\gamma(q) = 1 + \frac{1}{2}n(q-1) = \begin{cases} q & \text{se } n = 2 \\ 2q - 1 & \text{se } n = 4 \end{cases} \quad (4.13)$$

Usando, então, uma q -gaussiana como distribuição de probabilidade, os momentos generalizados $\langle x^2 \rangle_q$ e $\langle x^4 \rangle_{2q-1}$, ou q -momentos, convergem para $q < 3$. Essa breve discussão intuitiva que nos levou à Eq. (4.13) é feita de forma detalhada no trabalho de Tsallis, Plastino & Alvarez-Estrada [129].

Trocando a média convencional pela média de escort, estamos aptos a generalizar a Eq. (4.10) e escrever a definição da q -kurtosis κ_q :

$$\kappa_q = \frac{1}{3} \frac{\langle x^4 \rangle_{2q-1}}{\langle x^2 \rangle_q^2}$$

Indo além da discussão anterior sobre divergência, podemos supor que a densidade de probabilidade seja uma Q -gaussiana $P_Q(x)$, com parâmetro $Q \neq q$. Isso permite uma definição bastante geral da q -kurtosis:

$$\kappa_q(Q) = \frac{1}{3} \frac{\langle x^4 \rangle_{2q-1}}{\langle x^2 \rangle_q^2} = \frac{1}{3} \frac{\int dx x^4 [P_Q(x)]^{2q-1} / \int dx [P_Q(x)]^{2q-1}}{\left[\int dx x^2 [P_Q(x)]^q / \int dx [P_Q(x)]^q \right]^2} \quad (4.14)$$

$\kappa_1(Q)$ representa então a kurtosis convencional de uma FDP Q -gaussiana, cujo resultado sabemos ser a Eq. (4.12). Um pouco de álgebra e o auxílio do maple, fornece a solução da Eq. (4.14):

$$\kappa_q(Q) = \frac{(3 - 3Q + 2q)^2}{(1 - 3Q + 4q)(3 - 5Q + 4q)} \quad \text{restrições:} \quad \begin{cases} q \geq 1/2 & \text{se } Q \leq 1 \\ q > 0 & \text{se } 1 < Q < 3 \end{cases}$$

Escolhendo $Q=q$, finalmente chegamos ao resultado mais importante desta seção:

$$\kappa_q(q) = \frac{3-q}{1+q} \quad (q > 0) \quad (q\text{-kurtosis para a FDP } q\text{-gaussiana}) \quad (4.15)$$

Esta última expressão é confrontada adiante com os resultados obtidos a partir das distribuições de velocidades numéricas. A Eq. (4.15), em conjunto com a kurtosis convencional (4.12), está representada na Fig. 4.9 mais acima.

Apenas para complementar a discussão, vamos escrever separadamente os dois q -momentos presentes na definição da q -kurtosis (4.14). Supondo uma distribuição Q -gaussiana, o segundo q -momento é dado por[¶]:

$$\langle x^2 \rangle_q = \frac{2/\beta}{3 - 3Q + 2q} \quad \text{restrição:} \quad q > 0 \quad \text{e} \quad Q < 3$$

[¶]Uma Q -gaussiana com $Q = 2$ é a Lorentziana $P_2(x) = A_2/[1 + \beta x^2/2]$. O segundo q -momento neste caso vale $\langle x^2 \rangle_q = \frac{2/\beta}{2q-3}$, donde, para $q=Q$, $\langle x^2 \rangle_2 = 2/\beta \Rightarrow \sqrt{\langle x^2 \rangle_2} = \sqrt{2/\beta}$ [metade da FWHM, incidentalmente].

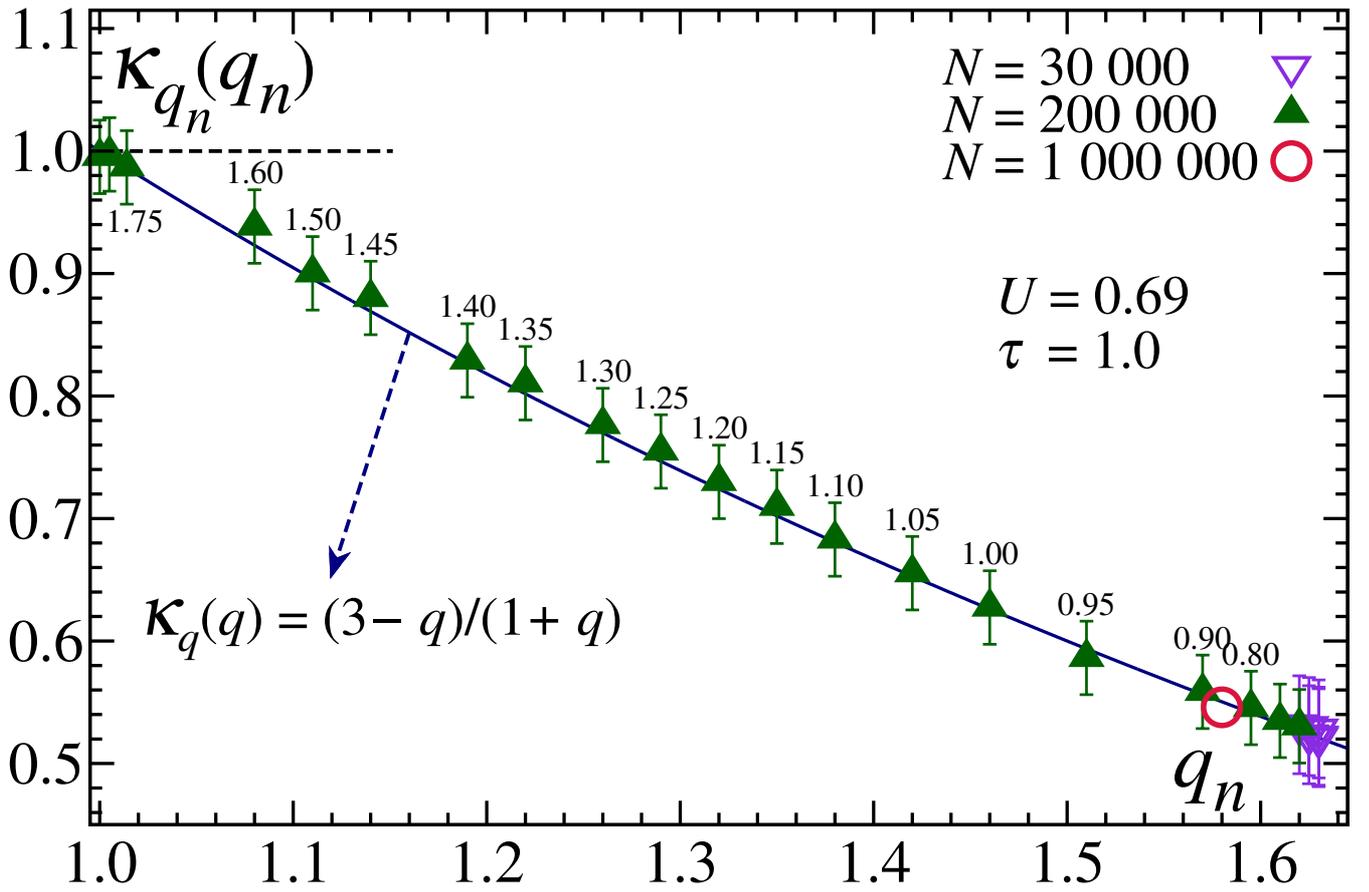


Fig. 4.10: q -kurtosis calculada numericamente a partir dos histogramas da distribuição de velocidades de acordo com a definição (4.14). Os valores q_n são os obtidos no ajuste e estão associados aos diversos valores do parâmetro α [indicados próximo aos símbolos]. Conforme α aumenta, a q -kurtosis se aproxima de $\kappa_{q_n}(q_n) = 1.0$ como esperado, uma vez que a distribuição se aproxima da Gaussiana. O círculo aberto [vermelho] corresponde ao histograma da Fig. 4.6 com $\alpha = 0.9$. A curva contínua é a q -kurtosis analítica da distribuição q -gaussiana [cf. Eq. (4.15)].

Já o quarto q -momento é:

$$\langle x^4 \rangle_{2q-1} = \frac{3(2/\beta)^2}{(1 - 3Q + 4q)(3 - 5Q + 4q)} \quad \text{restrições:} \quad \begin{cases} q \geq 1/2 & \text{se } Q \leq 1 \\ q > 0 & \text{se } 1 < Q < 3 \end{cases}$$

4.7.1 q -Kurtosis: Resultados Numéricos

De acordo com a Sec. 4.6, os histogramas das distribuições de velocidades foram ajustados com uma distribuição q -gaussiana $P_q(x)$. Variando o alcance da interação, obtivemos o comportamento de q em função do parâmetro α apresentado na Fig. 4.8. Para verificar a qualidade destes ajustes, a partir de cada histograma e do respectivo valor q_n , calculamos a q -kurtosis $\kappa_q(q)$ de acordo com a Eq. (4.14). Os cálculos forneceram o conjunto de valores $\kappa_{q_n}(q_n)$ associado aos diversos α 's representado na Fig. 4.10. Como podemos observar, os resultados numéricos são bastante bem descritos pela equação analítica (4.15), indicando que realmente a q -gaussiana representa uma função adequada para descrever as distribuições observadas nas simulações. Este mesmo procedimento, introduzido em [3], foi também repetido recentemente por Christodoulidi, Tsallis & Bountis no estudo de uma generalização da cadeia de Fermi-Pasta-Ulam na Ref. [97].

4.8 Influência da Duração do Intervalo Δt

Os histogramas exibidos na Sec. 4.6 foram construídos com um número n de medições na Eq. (4.9) suficientemente grande. Aguardar a distribuição estabilizar. Este foi o critério adotado para determinar o intervalo $\Delta t = n\tau$. Assim como a duração do estado quase estacionário, o intervalo ideal depende de α e N , sobretudo na região de longo alcance $\alpha < 1$, e quanto menor o valor de α e maior o tamanho N , mais tempo transcorre até a distribuição estabilizar. Numericamente, o procedimento para descobrir este intervalo ideal baseou-se em tentativas: aumentando-se gradativamente Δt e observando a distribuição resultante até o seu formato aparentemente final ser atingido. A seguir são apresentados exemplos que ilustram tal procedimento [Fig. 4.11 até a Fig. 4.14]. Como comentado, no limite $\Delta t \rightarrow \infty$ as distribuições podem eventualmente relaxar para um formato diferente do formato final estimado. As simulações indicam, entretanto, que o limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$ leva o sistema a se fixar no QSS quando $\alpha < 1$, a ordem destes limites merece então ser considerada com atenção. De qualquer maneira, para N fixo, a possibilidade dos limites $\Delta t \rightarrow \infty$ e $q_n \rightarrow 1$ andarem lado a lado não pode ser descartada. Aqui, continuamos trabalhando com um intervalo entre medições sucessivas de $\tau = 1.0$, e médias temporais avaliadas em regiões de temperatura cinética $T(t)$ estável, sempre após o QSS. Na próxima seção são exibidas distribuições construídas durante o QSS, e na Sec. 4.11 é investigada a influência do intervalo τ .

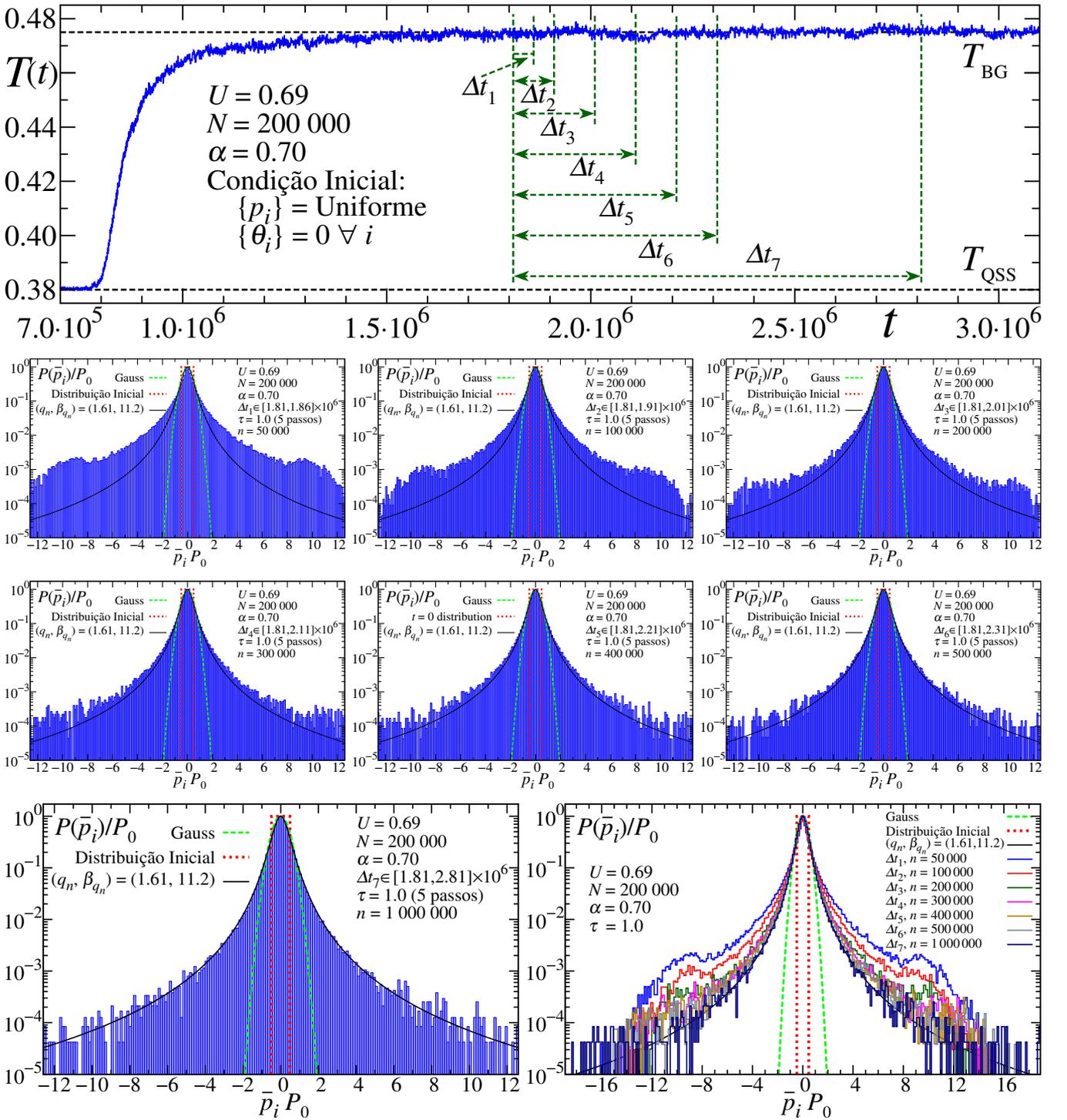


Fig. 4.11: **Acima:** Evolução da temperatura cinética para $(U, N, \alpha) = (0.69, 200\,000, 0.70)$ [dados presentes também na Fig. 4.3, aqui a abscissa é linear e o instante $t=0$ está à esquerda do gráfico para melhorar a visualização]. Neste painel estão demarcados 7 intervalos crescentes, de $\Delta t_1 = 50\,000$ até $\Delta t_7 = 1\,000\,000$. **Abaixo:** Histogramas associados a médias temporais sobre as 7 regiões demarcadas, todas calculadas usando $\tau = 1.0$ como intervalo entre medições sucessivas na Eq. (4.9). Até aproximadamente $\Delta t_5 = n\tau = 400\,000$, há uma significativa modificação no formato da distribuição em função de n . A partir de Δt_6 contudo, mesmo após o intervalo ser duplicado [$\Delta t_7 = 2\Delta t_6$], a distribuição praticamente se mantém estável. O par $(q_n, \beta_{q_n}) = (1.61, 11.1)$ que resultou do ajuste q -gaussiano do histograma correspondente a Δt_7 foi repetido nos demais [este histograma é um dos 12 da Fig. 4.7 e seus valores (q_n, β_{q_n}) estão na Fig. 4.8]. Para uma melhor comparação, a figura mais abaixo, à direita, é a superposição dos 7 histogramas anteriores numa abscissa mais ampla.

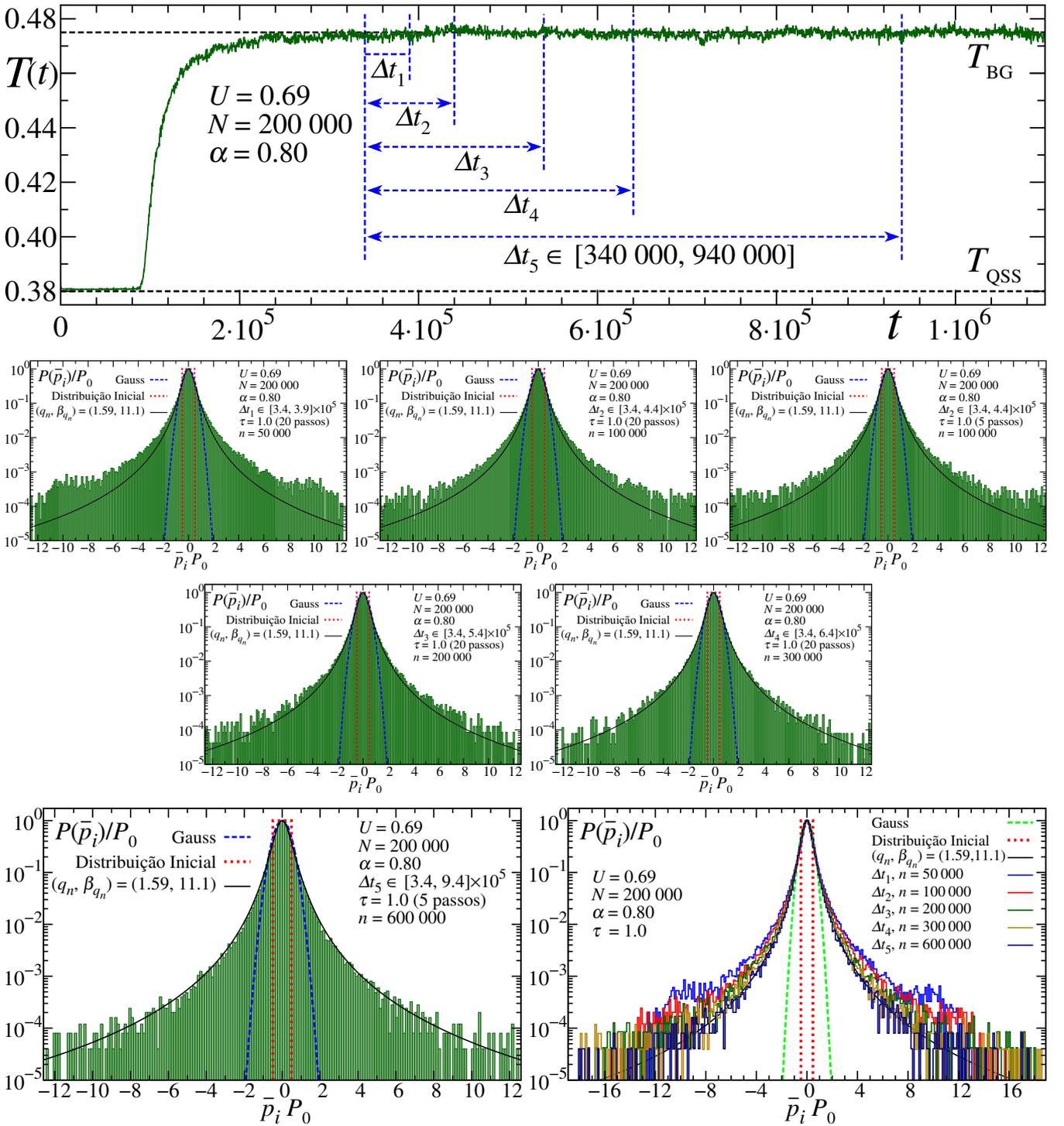


Fig. 4.12: Resultados equivalentes aos da Fig. 4.11, mas aqui para $\alpha = 0.80$. Aumentando o valor de α , o formato da distribuição estabiliza mais rapidamente, em torno de $\Delta t_4 = n\tau = 300\,000$. Associado ao intervalo $\Delta t_2 = 100\,000$, temos histogramas construídos com dois valores distintos para o passo de integração do algoritmo, $\tau = 1.0$ [20 passos] e $\tau = 1.0$ [5 passos], como indicado nas respectivas figuras [o efeito sobre o formato da distribuição é mínimo, como deveria, pressupondo as duas escolhas adequadas].

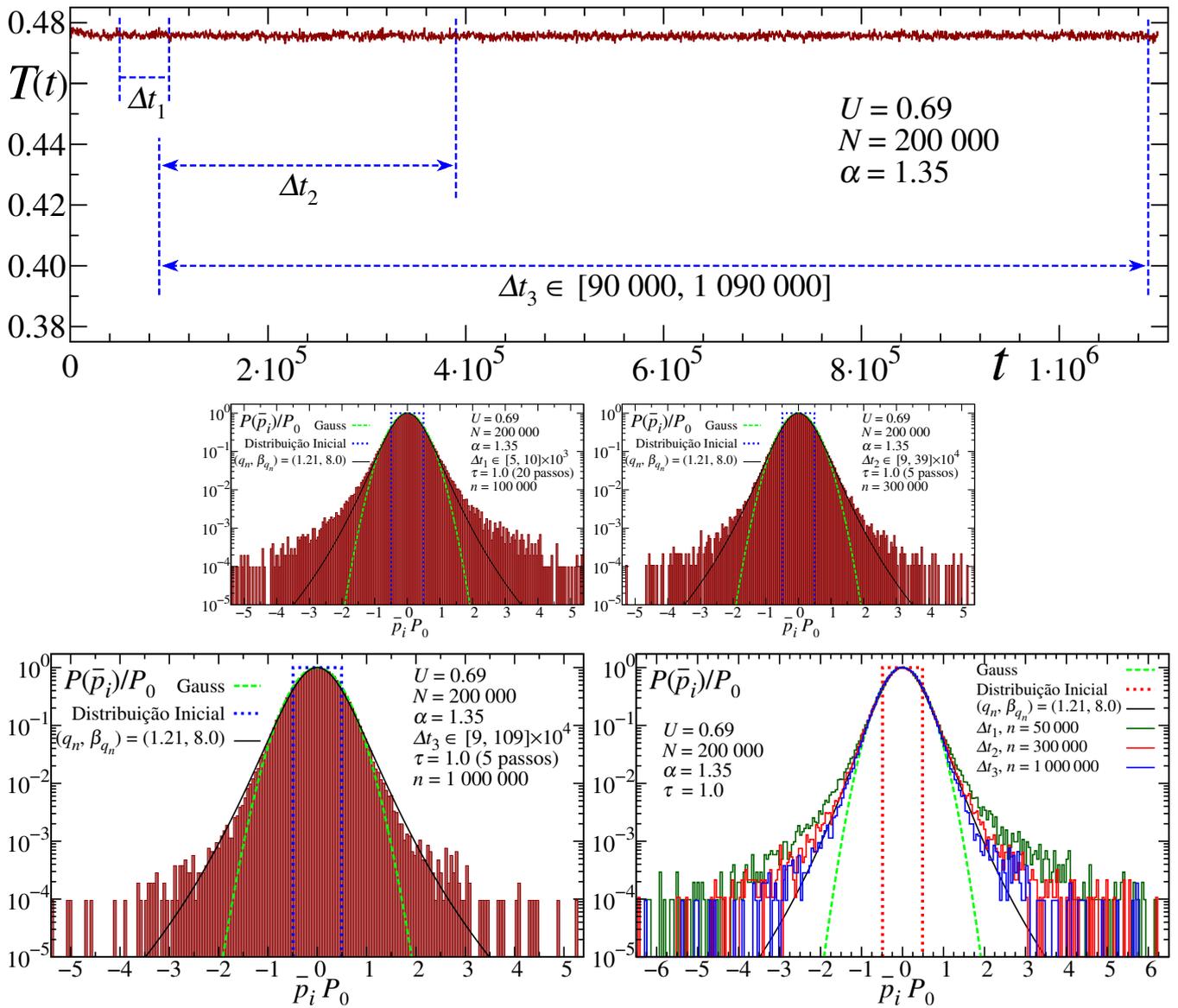


Fig. 4.13: Aqui temos $(\alpha, N) = (1.35, 200\,000)$. Observando o comportamento de q_n contra α na Fig. 4.8, vemos que $\alpha = 1.35$ está na região de transição entre $q_n \approx 1.6$ e $q_n = 1.0$. Mesmo para este valor de $\alpha > 1$ [curto alcance portanto], e mesmo após o intervalo Δt ser mais que triplicado [$\Delta t_3 > 3\Delta t_2$], a distribuição não atinge o formato Gaussiano.

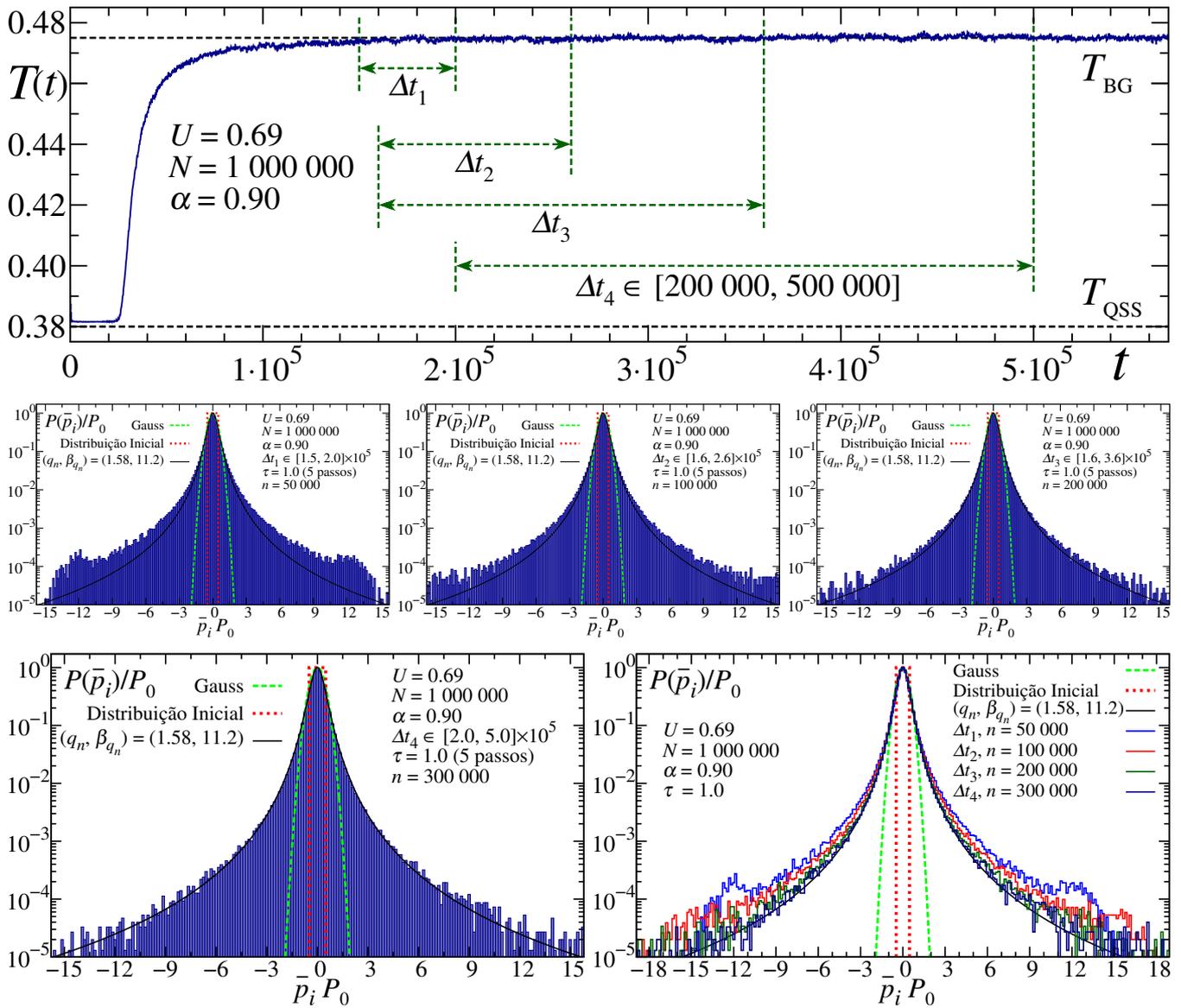


Fig. 4.14: Agora temos $(\alpha, N) = (0.90, 1\,000\,000)$. Aumentado N , a distribuição demora mais a estabilizar. Mas como α é próximo de $\alpha = 1$, o formato final [estimado] é atingido em torno de $\Delta t_3 = 200\,000$, mesmo para este valor grande de N . É difícil, na região de longo alcance $0 \leq \alpha < 1$, afirmar que $\lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} q_n(N, \Delta t) > 1$, porque, no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, o sistema tende a permanecer no QSS indefinidamente. Contudo, o resultado com a ordem dos limites invertida $\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} q_n(N, \Delta t) = 1$ não pode ser descartado. O histograma associado ao intervalo Δt_4 é o mesmo exibido anteriormente na Fig. 4.6, mas aqui a abscissa é mais ampla.

4.9 Influência da Região: Distribuição no QSS

Esta breve seção apresenta distribuições de velocidades construídas com a média temporal (4.9) cobrindo diferentes regiões. Aqui, as médias não foram calculadas apenas após a temperatura cinética $T(t)$ estabilizar, mas também durante a transição de T_{QSS} para T_{BG} e também durante o estado quase estacionário. O intuito dos resultados exibidos nas Figs. 4.15 e 4.16 a seguir, além de exibir distribuições construídas no QSS, é ilustrar a partir de qual instante na evolução do sistema as caldas típicas de q -gaussianas começam a se desenvolver.

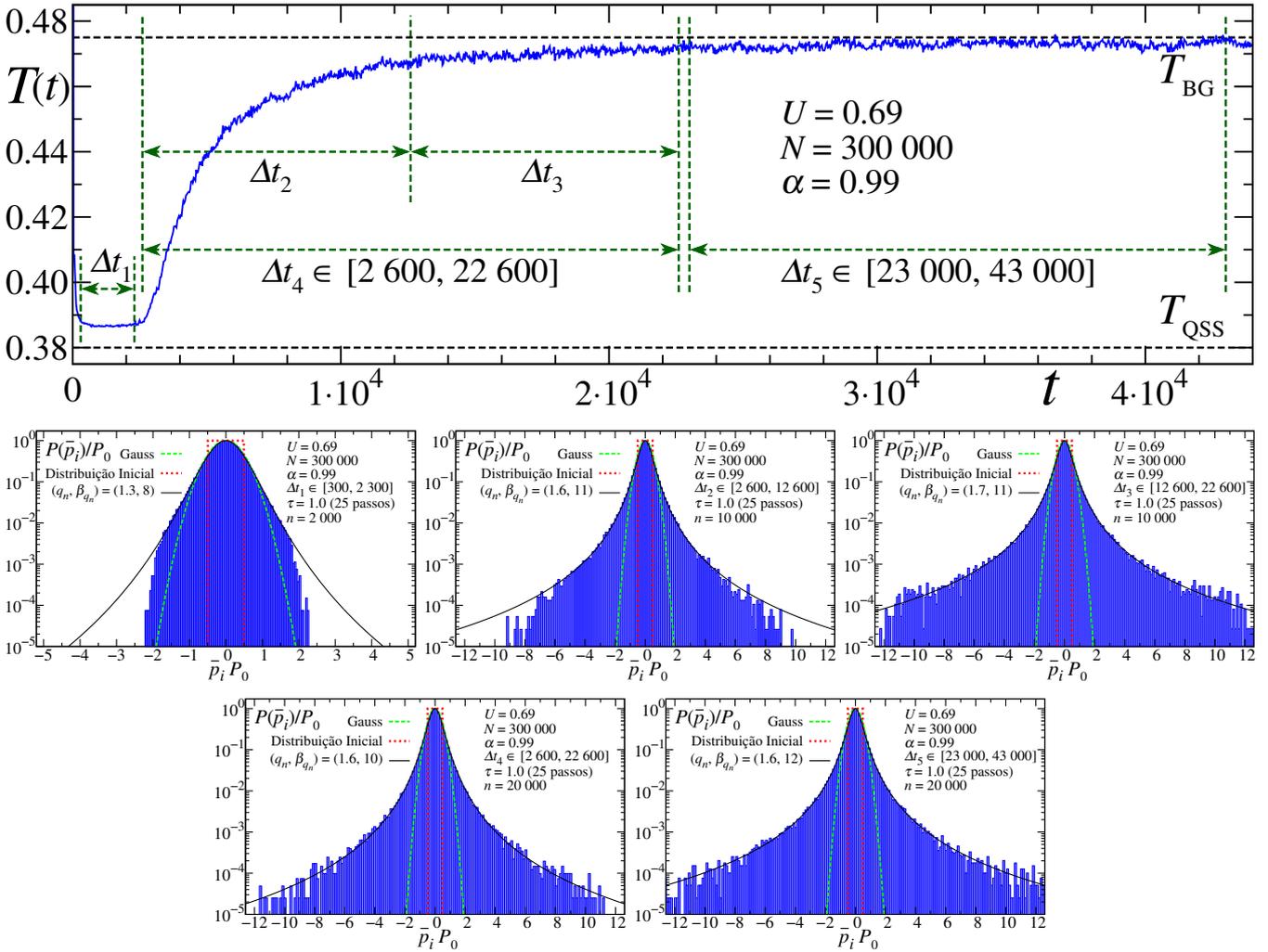


Fig. 4.15: **Acima:** Evolução da temperatura cinética para $(U, N, \alpha) = (0.69, 300\,000, 0.99)$. **Abaixo:** Histogramas associados às regiões demarcadas, um deles construído com a média temporal calculada inteiramente durante o QSS [o de menor calda, associado a Δt_1]. Notar que os dois histogramas construídos imediatamente após $T(t)$ abandonar o QSS já apresentam caldas mais largas [associados a Δt_2 e Δt_4]. As q -gaussianas analíticas servem apenas como referência.

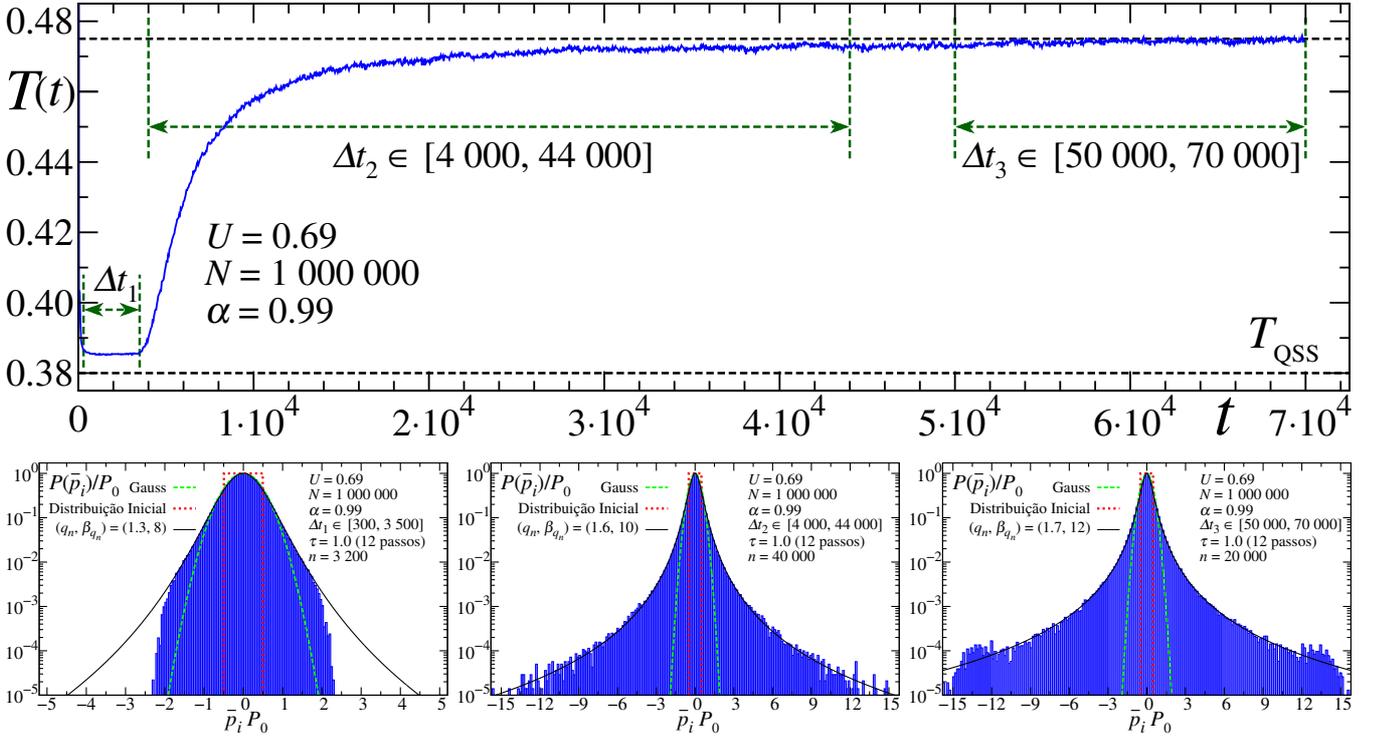


Fig. 4.16: Resultados equivalentes aos da Fig. 4.15, mas aqui para $N = 1\,000\,000$. Com N maior, a duração do QSS também é maior quando comparada com a da figura anterior [apesar de relativamente curta, pois $\alpha = 0.99 \approx 1$], porém as distribuições construídas durante o QSS são praticamente idênticas em ambos os casos.

4.10 Sobre o Expoente de Lyapunov

Após a divisão do potencial de interação por \tilde{N} [escalamento de Tsallis], o sistema torna-se extensivo e a caracterização do alcance da interação via divergência da energia interna, ou, equivalentemente, do potencial total, no limite $N \rightarrow \infty$ deixa de valer. Ele permanece, contudo, não aditivo no intervalo $0 \leq \alpha \leq d$: caso dois sistemas A e B regidos pela Hamiltoniana (4.1) sejam combinados, a energia interna conjunta será $U_{A+B} \neq U_A + U_B$, mesmo no limite $\lim_{N \rightarrow \infty} \langle \mathcal{H} \rangle / N = U$ [a energia de interface não se torna desprezível]. Portanto, apesar da extensividade recuperada, a natureza de longo alcance da interação ainda se faz presente, propriedade particularmente explicitada quando $\alpha = 0$ e o escalamento por $\tilde{N} = N$ reduz sua intensidade igualmente, independentemente da distância entre os rotores, e pela ocorrência de transição de fase mesmo em uma dimensão.

A presença de estados quase estacionários até $\alpha \gtrsim 1 = d$ [cf. Fig. 4.3] é uma assinatura do longo alcance da interação. Outra assinatura foi exibida na Fig. 4.8, na qual uma mudança de regime em torno de $\alpha \approx 1.0$ é evidente. Caso o QSS persista nos limites $t \rightarrow \infty$ e $N \rightarrow \infty$ [nesta ordem] ou a distribuição de velocidades mantenha o formato q -gaussiano para $N \rightarrow \infty$ e $\Delta t \rightarrow \infty$, como apontam os experimentos numéricos, o estado final do sistema terá valores termodinâmicos não canônicos $(T_{\text{QSS}}, M_{\text{QSS}}) \neq (T_{\text{BG}}, M_{\text{BG}})$ ou distribuição com $q \neq 1$, consequências bastante importantes da não aditividade. Outra evidência, agora de caráter estritamente dinâmico, de que a fronteira $\alpha = d$ demarca as regiões de longo e curto alcance, vem da análise do expoente de Lyapunov.

O expoente [máximo] de Lyapunov λ_{max} do modelo α -XY é conhecido analiticamente para $\alpha = 0$ e $\alpha \rightarrow \infty$, foram calculados respectivamente por Firpo [130] e Pettini *et al.* [131, 132] pelo Método Geométrico [133]. O resultado analítico apresenta bom acordo com as simulações [80, 134], as

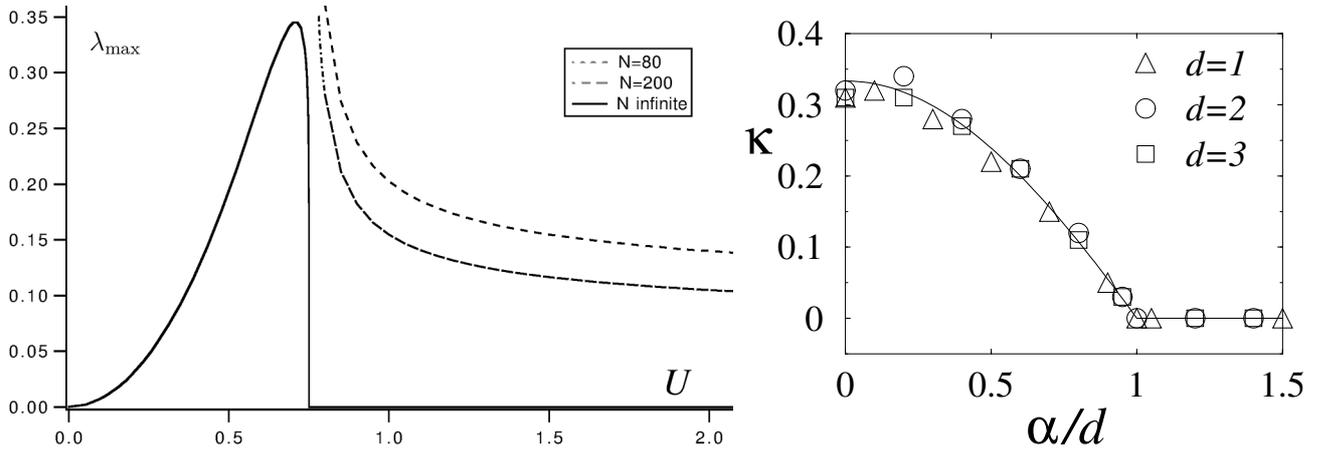


Fig. 4.17: Esquerda: Expoente de Lyapunov λ_{\max} em função da energia interna U para $\alpha=0$. A linha cheia é o resultado analítico correspondente a $N \rightarrow \infty$ [neste caso, $\lambda_{\max} = 0$ se $U > U_c = 0.75$], e as tracejadas são aproximações [analíticas] para N finito válidas para $U > U_c$. Resultados numéricos indicam que este resultado é aproximadamente válido em todo o intervalo $0 \leq \alpha/d < 1$.

Direita: Para $U > U_c$, o expoente de Lyapunov vai a zero com N como $\lambda_{\max} \propto 1/N^{\kappa(\alpha/d)}$, com $\kappa(\alpha/d)$ decrescendo de $\kappa(0) \approx 1/3$ até se anular em torno $\alpha/d \approx 1$, permanecendo nulo para $\alpha/d > 1$ [Lyapunov sempre positivo para interação de curto alcance]. Estes resultados numéricos correspondem à energia $U = 5.0$ [a linha cheia é apenas referência]. Figuras retiradas da Ref. [130, esquerda] e da Ref. [137, direita].

quais indicam também que o comportamento em toda região de longo alcance $0 \leq \alpha/d \leq 1$ se assemelha ao do caso particular $\alpha = 0$ [50, 54]. Para $\alpha \rightarrow \infty$ [interação de primeiros vizinhos] e ampla faixa de energia, λ_{\max} é positivo [sistema caótico], indo a zero para energias muito baixas e muito altas, à medida que o sistema se aproxima da integrabilidade[¶]. Para $\alpha=0$, o expoente λ_{\max} vai a zero de forma suave para energias baixas mas cai abruptamente quando $U > U_c$ [ver Fig. 4.17, gráfico à esquerda]. Nesta região acima da energia crítica, investigações numéricas, corroboradas por cálculos analíticos [135], mostram que o expoente de Lyapunov permanece positivo se $\alpha/d > 1$ [exceto no limite integrável $U \gg U_c$] e, caso $\alpha/d < 1$, gradualmente vai a zero em função do tamanho N como $\lambda_{\max} \propto 1/N^{\kappa}$, com $\kappa = \kappa(\alpha, d) = \kappa(\alpha/d)$ decrescendo de $\kappa(\alpha/d = 0) \approx 1/3$ até zero conforme α/d se aproxima da fronteira $\alpha/d = 1$ [Fig. 4.17, à direita]. Merece destaque o comportamento do expoente $\kappa(\alpha, d)$, que não depende de α e d de forma independente, mas através da razão α/d , resultado também observado em outro sistema [136] e que vai ao encontro da discussão sobre o alcance da interação que culminou na Fig. 3.1, Pág. 22.

Diversos estudos apontam para uma relação entre o expoente de Lyapunov e a mecânica estatística não extensiva [ver [10], Caps. 3 e 5], particularmente quando $\lambda_{\max} \approx 0$ por motivos não “triviais” [i.e., ligados à integrabilidade], algumas vezes associados ao limiar do caos [e.g., ponto de Feigenbaum do mapa logístico]. Na próxima seção são apresentadas distribuições de velocidades obtidas de simulações com energia $U = 0.90 > U_c = 0.75$. Os resultados observados na região de longo alcance $\alpha/d < 1$ podem ser consequência de que sob estas condições o expoente de Lyapunov se anula no limite $N \rightarrow \infty$.

[¶]O modelo α -XY (4.1) tem dois limites integráveis. No limite de altas energias, em razão da energia potencial ser limitada, o termo cinético é dominante e o sistema comporta-se como um conjunto de rotores livres. Para energias muito baixas, a expansão $\cos(\theta_i - \theta_j) \approx 1 - \frac{1}{2}(\theta_i - \theta_j)^2$ em torno de $\theta_i - \theta_j \approx 0$, associada ao mínimo do potencial, resulta numa cadeia de osciladores harmônicos acoplados.

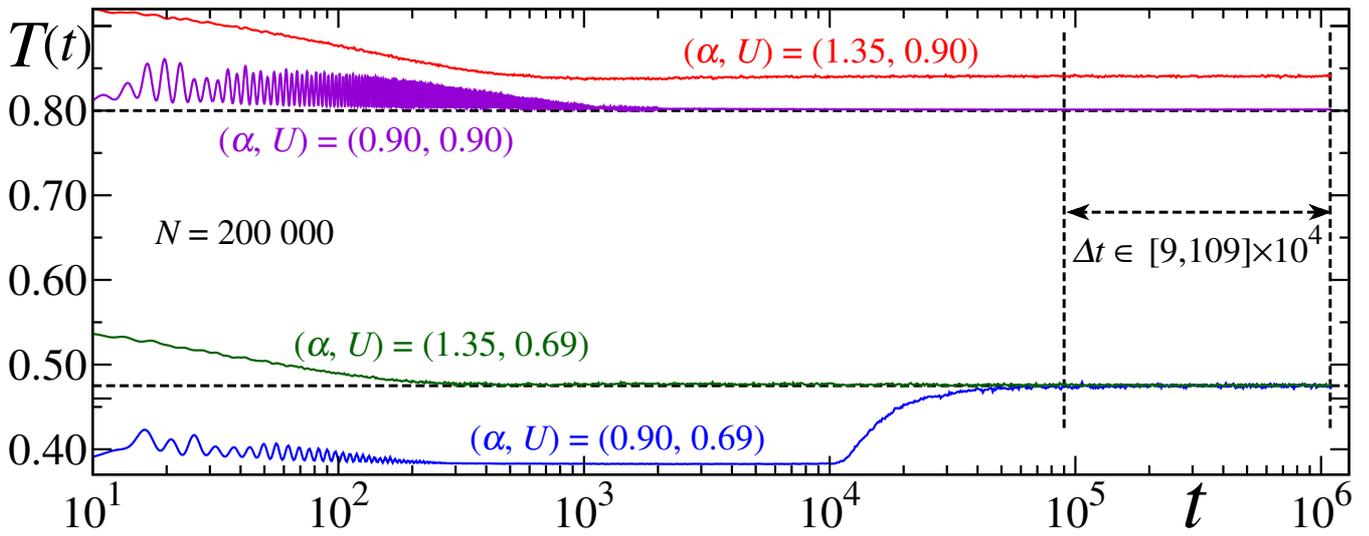


Fig. 4.18: Temperatura cinética para $N = 200\,000$ e uma combinação entre dois valores de α e dois de U . Para $(\alpha, U) = (0.90, 0.69) < (1, U_c = 0.75)$ [em azul], primeiro $T(t)$ se fixa no QSS e depois atinge o resultado canônico $T_{\text{BG}} \approx 0.475$ [linha tracejada inferior]. Para $(\alpha, U) = (0.90, 0.90)$ [violeta], não há QSS e rapidamente $T(t)$ atinge o resultado canônico $T = 2U - 1 = 0.8$ correspondente a esta energia [linha superior]. Para as combinações envolvendo $\alpha > 1$, $(\alpha, U) = (1.35, 0.69)$ [verde] e $(\alpha, U) = (1.35, 0.90)$ [vermelho], também não há QSS e $T(t)$ logo estabiliza, coincidentemente próximo a T_{BG} quando $U = 0.69$ [desconhecemos solução analítica para $1 \leq \alpha < \infty$]. A região demarcada compreendendo o período $\Delta t = 1\,000\,000$, indica onde as médias temporais que produziram os histogramas das Figs. 4.20 e 4.21 foram calculadas. Os dados correspondentes a $U = 0.69$ são os mesmos exibidos na Fig. 4.3 mais acima.

4.11 Comportamento de q em Função do Intervalo τ

Todos os histogramas apresentados até o momento foram construídos com energia $U = 0.69 < U_c$ e intervalo entre medições sucessivas na Eq. (4.9) igual a $\tau = 1.0$. É natural que este intervalo afete a distribuição, uma vez que observações de grandezas dinâmicas referentes ao sistema (4.1) espaçadas de $\tau \gg 1.0$ tendem a ser decorrelacionadas. Com efeito, distribuições construídas com uma única medição, situação que pode ser associada a medições espaçadas de $\tau \rightarrow \infty$, revelam uma Gaussiana para qualquer α e qualquer energia, desde que o sistema tenha atravessado o estado quase estacionário. Não realizamos um estudo direto de funções de correlação[¶], o procedimento seguido foi construir distribuições de velocidades usando intervalos entre medições crescentes, de $\tau = 1$ até $\tau = 10\,000$. Com médias temporais calculadas sobre um período $\Delta t = n\tau$, manter n fixo aumentando τ significa aumentar [muito] Δt . Para sistemas grandes [e.g., $N = 200\,000$], comparar distribuições de mesmo n e de diferentes τ 's é inviável por motivos computacionais^{‡‡}, de modo que Δt foi a quantidade fixada. O período Δt foi escolhido tal que o intervalo máximo $\tau = 10\,000$ resultasse em um número mínimo de medições igual a $n = 100$, valor grande o suficiente para que, mediante a receita do Teorema do Limite Central, uma sequência idealmente decorrelacionada produza uma Gaussiana, conforme ilustrado na Fig. 4.5 na Pág. 37 mais acima.

A Fig 4.18 exhibe a evolução temporal da temperatura cinética $T(t)$ para quatro realizações do

[¶]Para $\alpha = 0$, tal estudo foi feito, por exemplo, em [138, 139]. Estes trabalhos detectaram *aging* e correlações que decaem como q -exponenciais, com $q \approx 1.6$ no caso da velocidade $\langle p_i(t) p_i(t+\tau) \rangle$, e $q \approx 2.3$ no caso da fase $\langle x_i(t) x_i(t+\tau) \rangle$, sendo $x = (\theta, p)$.

^{‡‡}A unidade mais apropriada para medir o tempo de cada simulação deste trabalho é o dia, em códigos paralelizados e computadores atuais.

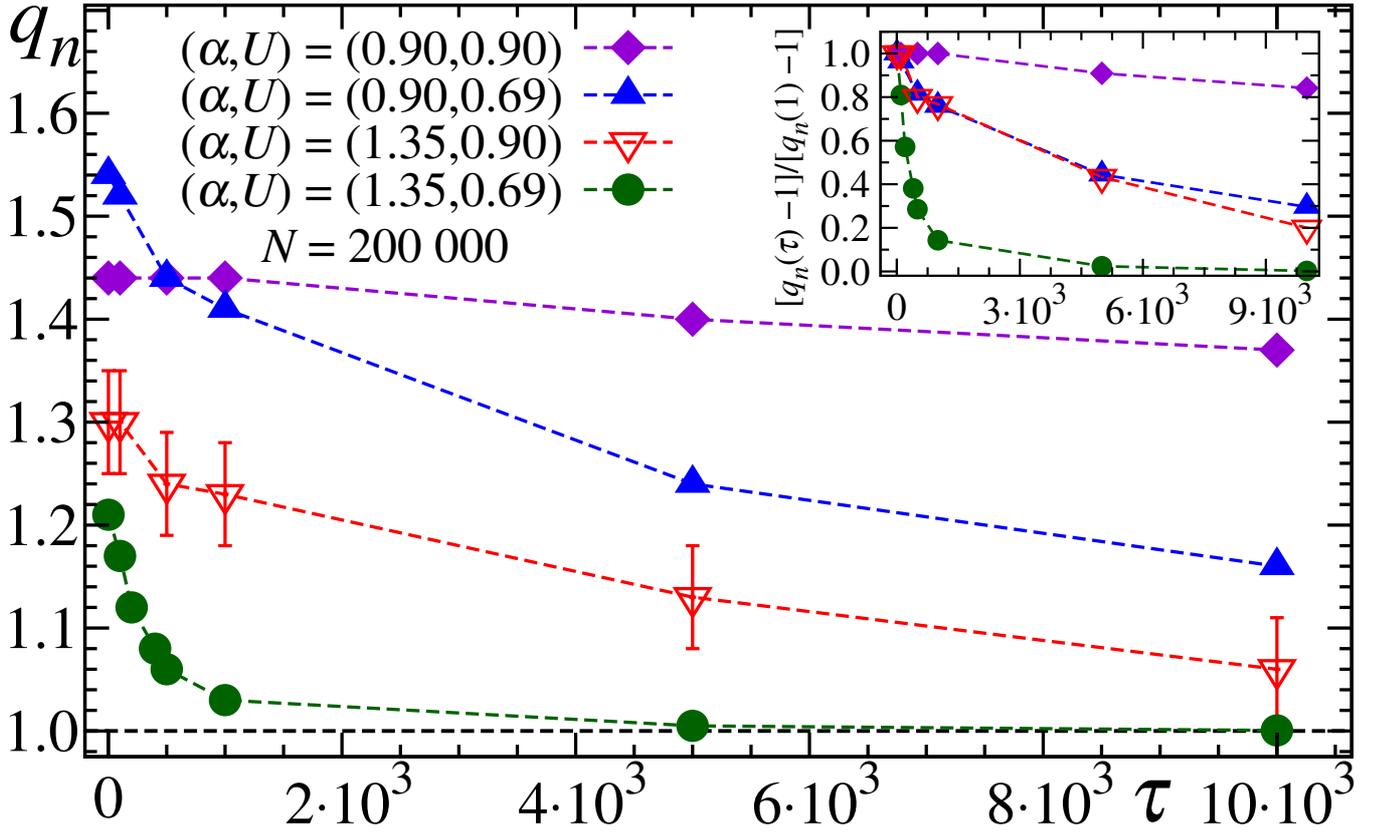


Fig. 4.19: Comportamento de q_n em função do intervalo τ entre medições sucessivas na soma (4.9) para duas energias [abaixo e acima de $U_c = 0.75$] e dois valores de α [abaixo e acima de $\alpha = 1$]. Conforme τ aumenta, q_n se aproxima do valor Boltzmanniano $q_n = 1$ nas quatro combinações de α e U . Contudo a aproximação é lenta para $(\alpha, U) = (0.9, 0.9)$ [em violeta], sai com derivada zero com respeito a τ . Esta é única combinação em que o expoente de Lyapunov se anula no limite $N \rightarrow \infty$. No *inset*, os mesmos dados representados com $[q_n(\tau) - 1] / [q_n(1) - 1]$ na ordenada. As barras de erro são da mesma ordem daquelas indicadas nos triângulos abertos [vermelhos], e as linhas tracejadas são apenas referências. Alguns dos histogramas que produziram estes resultados são exibidos nas Figs. 4.20 e 4.21 a seguir.

sistema (4.1), correspondentes a combinações entre dois valores de α , $\alpha = 0.90$ e $\alpha = 1.35$ [abaixo e acima de $\alpha = 1$] e dois valores da energia, $U = 0.69$ e $U = 0.90$ [abaixo e acima de $U_c = 3/4 = 0.75$]. A região demarcada indica onde as médias temporais que resultaram nos histogramas foram calculadas. Para $U = 0.69$, nenhuma novidade: se $\alpha = 0.90$, o sistema permanece no QSS por um tempo, com $T(t) \approx T_{\text{QSS}} = 0.38$, e depois alcança o resultado canônico $T(t) \approx T_{\text{BG}} = 0.475 \dots$; e se $\alpha = 1.35$, o QSS não é observado e a temperatura cinética rapidamente estabiliza após breve transiente, curiosamente muito próxima a T_{BG} . Já para $U = 0.90$, estados quase estacionários não são detectados para nenhum α : $T(t)$ logo atinge o valor canônico $T = 2U - 1 = 0.8$ se $\alpha = 0.90$, e, se $\alpha = 1.35$, logo estabiliza numa temperatura intermediária entre $T = 0.8$ e o resultado correspondente ao modelo com $\alpha \rightarrow \infty$.

Os histogramas construídos sobre a região demarcada na Fig. 4.18, compreendendo o período $\Delta t = n\tau = 1\,000\,000$, são exibidos nas Figs. 4.20 e 4.21 mais à frente. Cada média temporal foi calculada com intervalo τ fixo entre medições sucessivas, com τ variando entre $\tau = 1$ e $\tau = 10\,000$, perfazendo um total de medições entre $n = 1\,000\,000$ e $n = 100$ [informações registradas nas respectivas figuras]. O resultado do ajuste desses histogramas está reunido na Fig. 4.19. O ajuste é melhor para energias abaixo da crítica, como comentado na Sec. 4.6, mas o formato q -gaussiano se

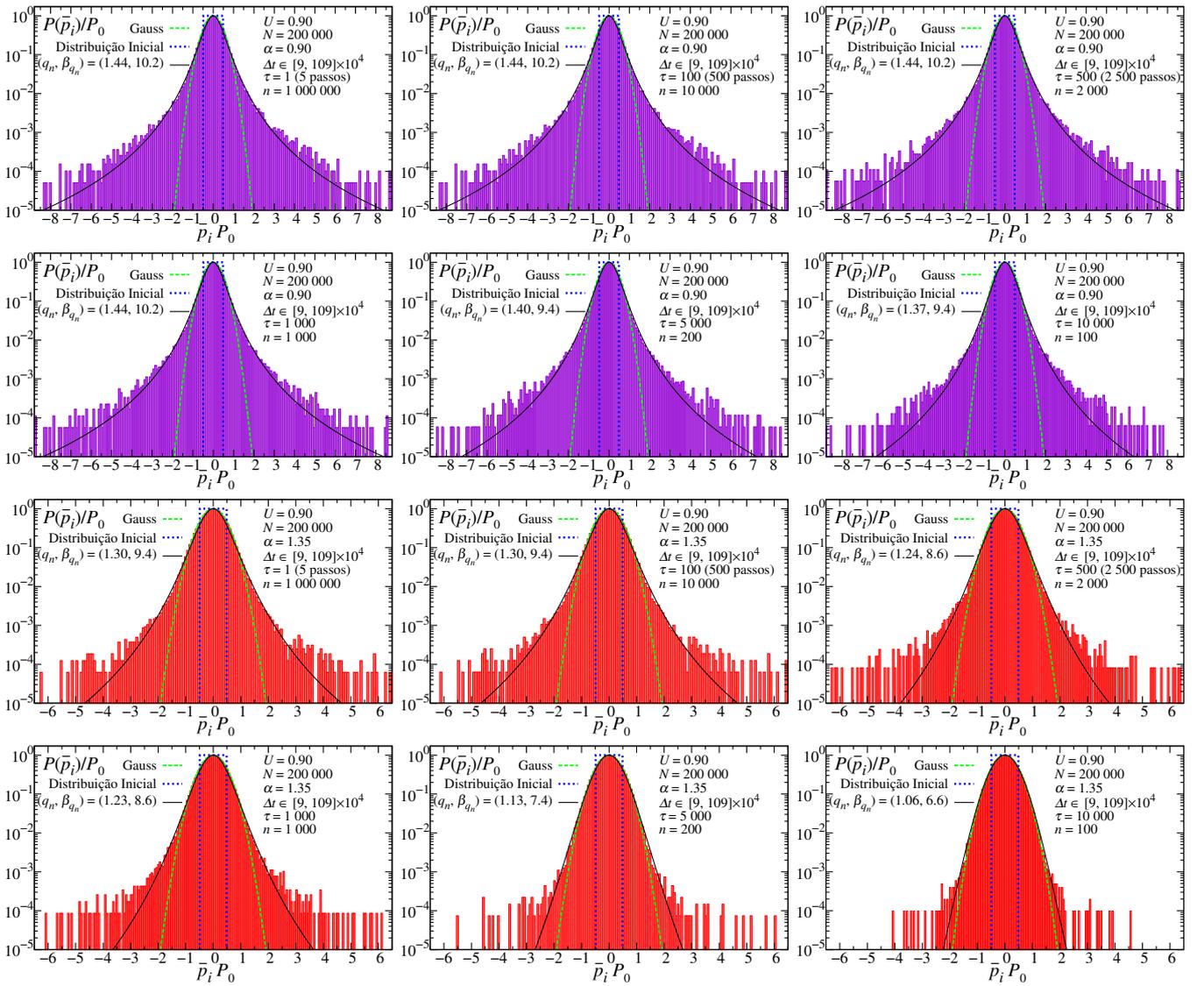


Fig. 4.20: Distribuições de velocidades referentes à região demarcada na Fig. 4.18 para $(U, \alpha) = (0.90, 0.90)$ [6 histogramas mais acima] e $(U, \alpha) = (0.90, 1.35)$ [$U > U_c = 0.75$ em ambos os casos]. Como o período de medição $\Delta t = n\tau$ é fixo, conforme τ aumenta, o número de medições n diminui. A região demarcada compreende o período $\Delta t = 1\,000\,000$, resultando em $n = 1\,000\,000$ medições se $\tau = 1$ [menor intervalo entre medições] e em $n = 100$ se $\tau = 10\,000$ [maior intervalo]. Quando $(U, \alpha) = (0.90, 0.90)$ [regime em que o expoente de Lyapunov se anula], o formato da distribuição praticamente não se modifica ao menos até $\tau = 1\,000$.

manifesta com razoável clareza também para $U > U_c$.

Uma característica esperada do comportamento de q_n em função de τ revelada pela Fig. 4.19 é a aproximação, nas quatro situações analisadas, de q_n do valor Boltzmanniano $q_n = 1$ conforme τ aumenta. Uma vez que as combinações de α e U escolhidas para este conjunto de simulações representam regiões de propriedades comuns do sistema — abaixo e acima de $\alpha = 1$, abaixo e acima de U_c —, podemos generalizar este resultado para qualquer α e qualquer energia com [certa] segurança. Em símbolos: $\lim_{\tau \rightarrow \infty} q_n(\alpha, U, N, \tau) = 1 \forall \alpha, U$. Contudo, a aproximação de $q_n = 1$ é mais rápida nos dois casos com $\alpha = 1.35$ e também para $(\alpha, U) = (0.90, 0.69) < (d, U_c)$, e extremamente lenta quando $(\alpha, U) = (0.90 < d, 0.90 > U_c)$, saindo, neste último caso, com derivada nula com respeito a τ , como pode ser notado diretamente pelos histogramas correspondentes da Fig. 4.20, onde o formato da distribuição permanece praticamente inalterado ao menos até $\tau = 1\,000$. Esse último re-

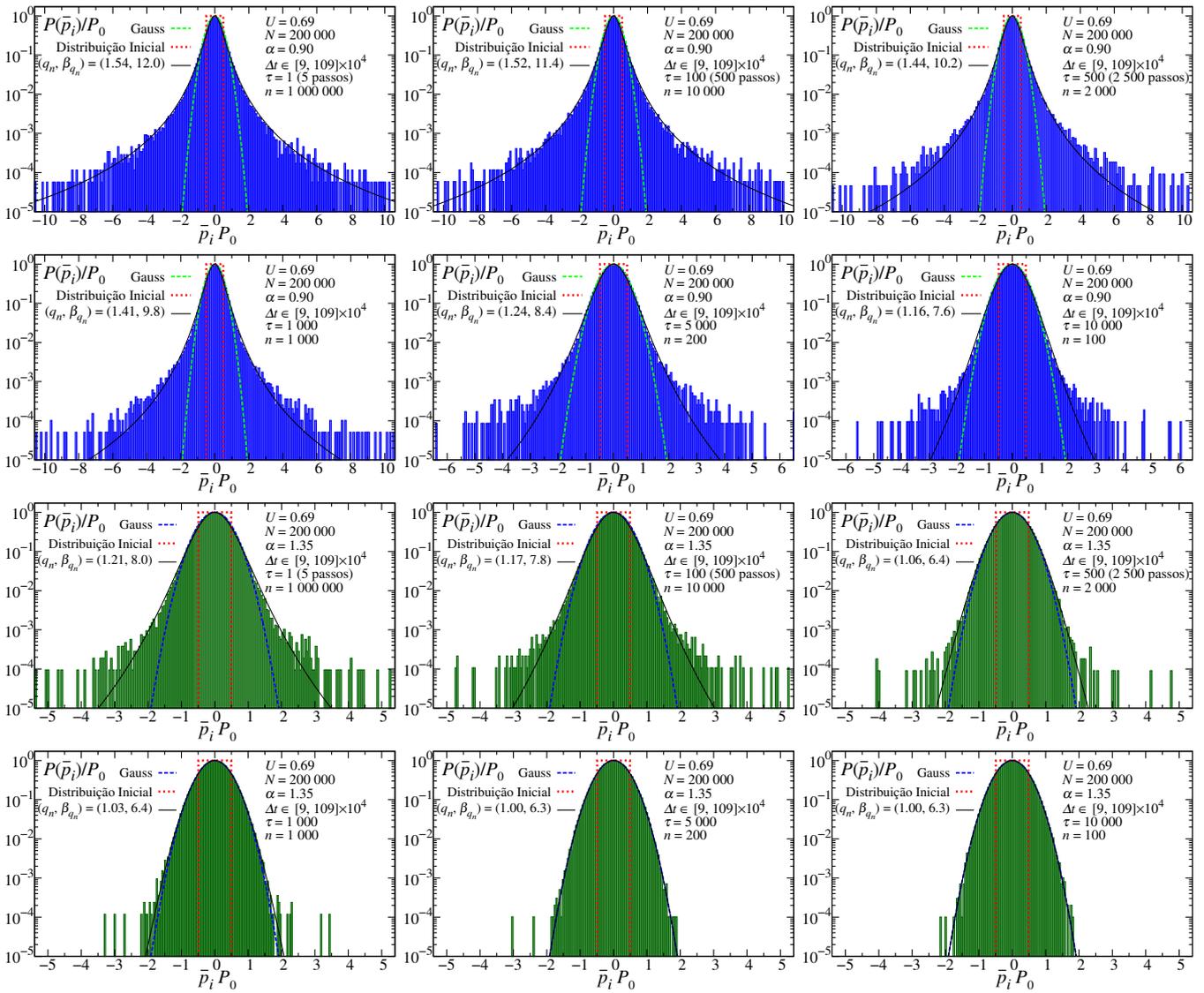


Fig. 4.21: Resultados equivalentes aos da Fig. 4.20, aqui para $(U, \alpha) = (0.69, 0.90)$ e $(U, \alpha) = (0.69, 1.35)$ [$U < U_c$ em ambos os casos]. Para $(U, \alpha) = (0.69, 1.35)$ [curto alcance, Lyapunov sempre positivo], o formato Gaussiano é atingido rapidamente.

sultado merece ser olhado com atenção. Em primeiro lugar porque se $U > U_c$ o QSS não é detectado, eliminando a discussão referente à ordem dos limites $N \rightarrow \infty$ e $t \rightarrow \infty$. Sem o sistema ficar preso ao QSS, as distribuições poderiam, em princípio, ser construídas no limite termodinâmico. Também, $q_n(\tau)$ se aproxima lentamente de $q_n = 1$ quando $(\alpha, U) = (0.9, 0.9)$, valores que correspondem precisamente à região em que o expoente de Lyapunov se anula com o aumento de N [cf. Sec. 4.10], resultado que sugere a seguinte convergência não uniforme: $\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\tau \rightarrow \infty} q_n(\alpha, U, N, \tau) = 1 \forall \alpha, U$, porém $\lim_{\tau \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} q_n(\alpha, U, N, \tau) > 1$ para $0 \leq \alpha < 1$ e $U > U_c$. Verificar esta conjectura, no entanto, é extremamente custoso computacionalmente.

4.12 Médias sobre Realizações

Os resultados desta seção representam uma tentativa de comparação entre médias temporal e de ensemble⁴. Decerto, dinâmica molecular não é a técnica computacional mais conveniente para produzir valores médios de ensemble, sobretudo em simulações com sistemas grandes como os deste

⁴Resultados solicitados por um dos Referees de [3].

trabalho. De qualquer maneira, é possível nos aproximar do que seria uma média de ensemble calculando médias sobre grandezas derivadas de eventos distintos, ou seja, médias envolvendo realizações numéricas do sistema (4.1) na qual a única diferença entre uma e outra é a semente do gerador aleatório que determina a distribuição inicial dos momentos.

O painel superior na Fig. 4.22 exibe a evolução temporal da média da temperatura cinética $\langle T(t) \rangle$

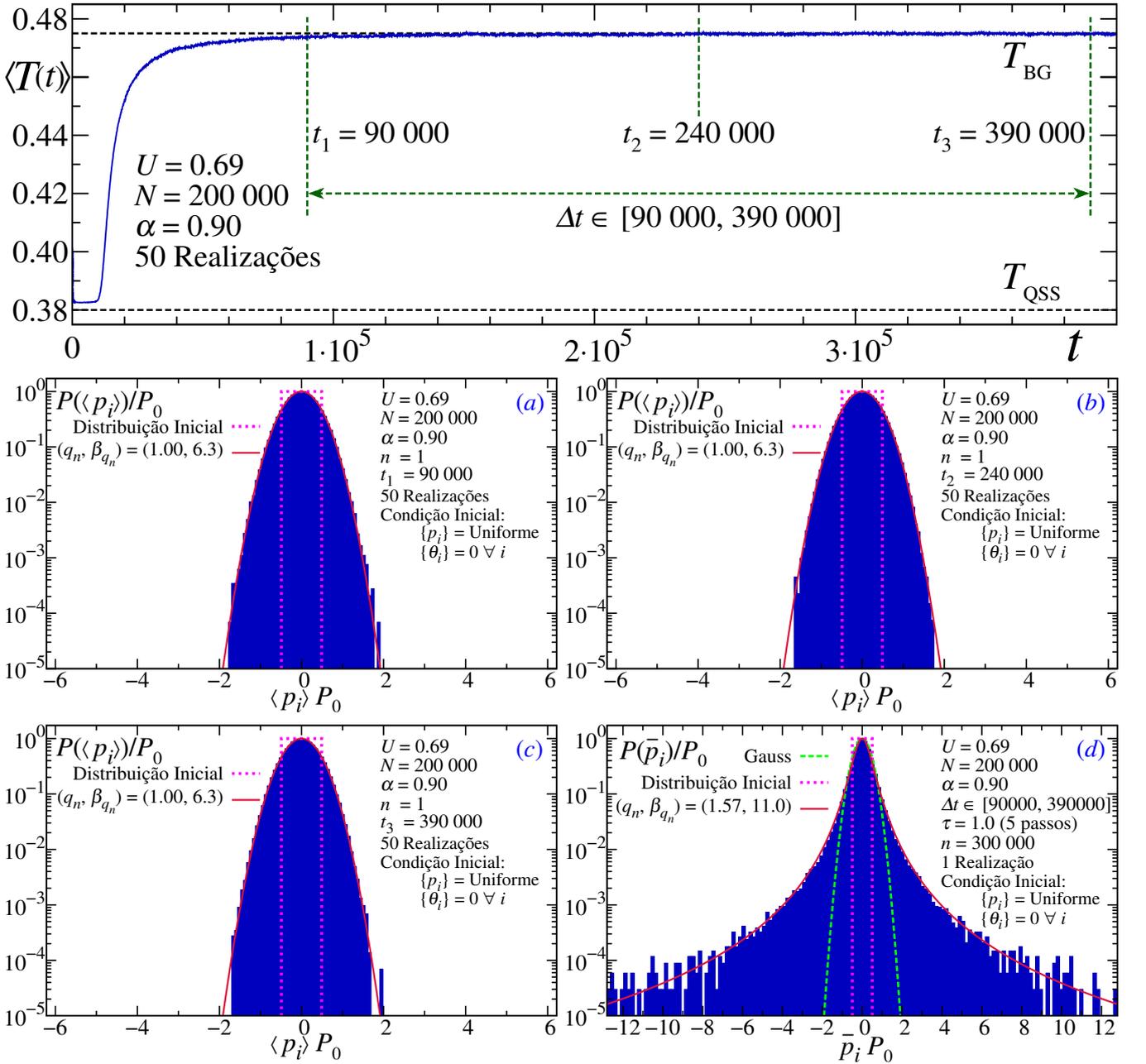


Fig. 4.22: **Acima:** Temperatura para $(\alpha, U, N) = (0.90, 0.69, 200\,000)$ promediada sobre 50 realizações, *i.e.*, o sistema foi simulado 50 vezes com diferentes sementes do gerador aleatório que define a distribuição inicial de velocidades [uma dessas está na Fig. 4.3], então uma média aritmética foi calculada. **Abaixo:** Painéis (a), (b) e (c): Distribuição da média dos momentos calculada sobre as 50 realizações nos três instantes indicados no gráfico superior, $t_1 = 90\,000$, $t_2 = 240\,000$ e $t_3 = 390\,000$. Painel (d): Distribuição da média temporal dos momentos de uma única realização calculada sobre o período $\Delta t = 300\,000$ [igual às seções acima; este gráfico está na Fig. 4.7]. O mesmo experimento repetido para α grande [e.g., $\alpha = 2.0$], produziria uma Gaussiana também para a média temporal, de modo que os quatro painéis (a)–(d) seriam essencialmente idênticos neste caso.

avaliada sobre 50 eventos assim construídos, todos com $(\alpha, U, N) = (0.90, 0.69, 200\,000)$. Para não haver dúvida, denotando por $T_k(t)$, $k = 1, 2 \dots 50$, a temperatura de cada um desses eventos, $\langle T(t) \rangle$ é simplesmente a média aritmética $\langle T(t) \rangle = \frac{1}{50} \sum T_k(t)$ calculada em todos os t 's registrados [$T_1(t)$ está na Fig. 4.3, Pág. 32, mais acima]. Na evolução de $\langle T(t) \rangle$ há demarcados três instantes, $t_1 = 90\,000$, $t_2 = 240\,000$ e $t_3 = 390\,000$, e o período $\Delta t = t_3 - t_1 = 300\,000$. Sobre este período Δt foi calculada a média temporal dos momentos de *apenas uma* dessas realizações, exatamente como nas seções anteriores. Já em t_1 , t_2 e t_3 foi registrado o momento de cada rotor de *todas as* 50 realizações; a partir destes dados, as médias $\langle p_i \rangle = \frac{1}{50} \sum p_i(t_k)$ em $t_k = t_1, t_2$ e t_3 foram calculadas. Os gráficos inferiores na Fig. 4.22 exibem as distribuições de velocidades oriundas desses dois procedimentos: média temporal cobrindo Δt em um único evento [painel (d), distribuição de \bar{p}_i], e média sobre 50 eventos em três instantes distintos [painéis (a), (b) e (c), distribuição de $\langle p_i \rangle$], todos os quatro painéis apresentam, portanto, histogramas com a mesma quantidade de dados, histogramas com $N = 200\,000$ números no caso.

Em razão de $\alpha = 0.9 < 1$ [longo alcance], a distribuição associada à média temporal é bem ajustada por uma q -gaussiana, como já verificado previamente [este gráfico foi exibido na Fig. 4.7]. Por outro lado, as médias sobre eventos resultam em Gaussianas nos três instantes considerados. Este mesmo experimento repetido para α suficientemente grande [*e.g.*, $\alpha = 2.0$, curto alcance], produziria quatro distribuições essencialmente idênticas [como se depreende da Fig. 4.6], uma vez que a média temporal agora resultaria numa Gaussiana, resultado condizente com um sistema ergódico. Embora tenhamos calculado as médias sobre 50 realizações, as Gaussianas observadas em t_1 , t_2 e t_3 mantêm-se praticamente inalteradas já a partir de algumas poucas delas [5, por exemplo], em outras palavras: 50 é um número bem acima do necessário a fim de se atingir resultados invariantes. Mesmo considerando apenas uma realização, situação que pode ser associada a $\tau \rightarrow \infty$ na discussão da Sec. 4.11, a diferença em relação ao histogramas exibidos nos painéis (a), (b) e (c) é muito pequena, de modo que conclusões análogas às oferecidas pela Fig. 4.22 podem ser obtidas simplesmente das distribuições de \bar{p}_i e de $p_i(t_k)$. Ademais, o registro dos momentos em um único instante t dentro do QSS, de um único evento, resulta numa distribuição de formato próximo ao inicial [não exibiremos este resultado aqui, a informação pode ser útil para comparação com os histogramas das Figs. 4.15 e 4.16 construídos com médias sobre Δt durante o QSS]. Apesar da diferença na distribuição de velocidades, acrescida das evidências que o sistema se fixa no QSS indefinidamente quando $N \rightarrow \infty$, apontar para quebra de ergodicidade, é importante sublinhar que os resultados numéricos correspondentes à temperatura cinética $T(t)$ [ou à magnetização $M(t)$] revelam ergodicidade desta grandeza após o QSS [*i.e.*, $\langle T(t) \rangle_{\text{Tempo}} \approx T_{\text{BG}}$].

4.13 Sobre a Distribuição Angular

A fim de explorar um pouco mais a termoestatística do modelo, é útil analisar brevemente a distribuição dos ângulos θ_i 's. Na fase paramagnética ou quando $\alpha \gg 1$, a direção dos spins \mathbf{S}_i 's é aleatória, conseqüentemente a magnetização é nula e os ângulos estão distribuídos uniformemente no intervalo $[-\pi, \pi]$; em símbolos: $\Theta(\theta) = 1/2\pi$ se $M = 0$. Na fase ferromagnética, é possível uma abordagem analítica quando $\alpha = 0$ por meio da equação de Vlasov, da qual se espera representar o sistema no limite $N \rightarrow \infty$. Assumindo que a densidade de probabilidade de partícula única se fature, $F(p, \theta, t) = P(p)\Theta(\theta, t)$, e que a distribuição de velocidades $P(p)$ seja Maxwelliana, a solução

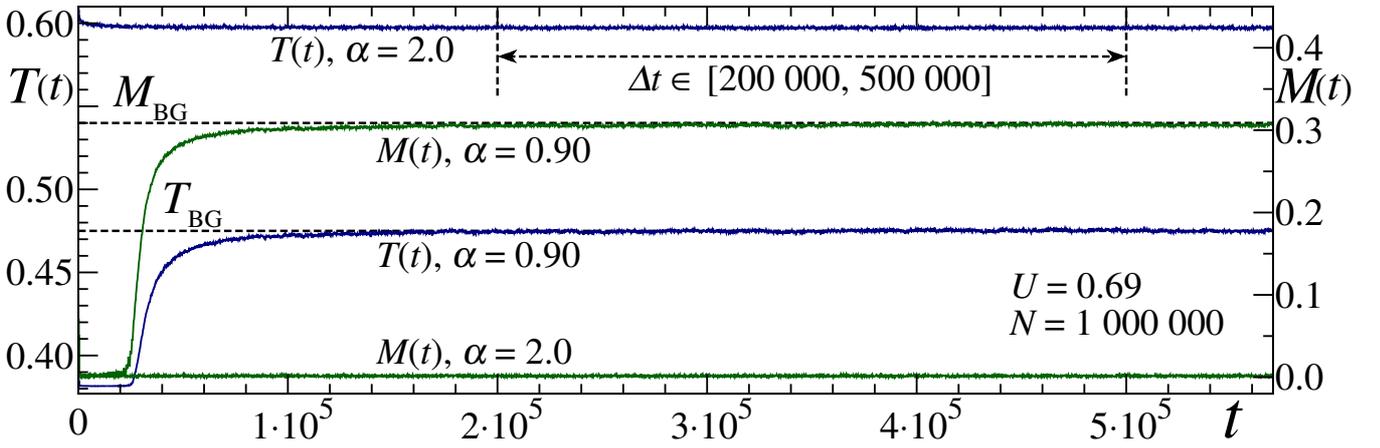


Fig. 4.23: Temperatura e magnetização para $(U, N) = (0.69, 1\,000\,000)$ e dois valores de α . Para $\alpha = 0.90$, primeiro $T(t)$ e $M(t)$ flutuam próximos a $(T_{\text{QSS}}, M_{\text{QSS}}) = (0.38, 0)$ e depois alcançam os valores canônicos $(T_{\text{BG}}, M_{\text{BG}}) \approx (0.475, 0.309)$ [linhas tracejadas horizontais]. Para $\alpha = 2.0$, não há QSS. A magnetização rapidamente atinge $M(t) \approx 0$ enquanto $T(t)$ estabiliza num valor intermediário entre T_{BG} e $T_{\infty} \approx 0.711$. A região demarcada Δt indica onde as médias temporais dos ângulos que produziram os histogramas da Fig. 4.25 foram calculadas. Na Fig. 4.24 estão os histogramas construídos com um único registro dos ângulos no instante $t = 500\,000$. Estas duas realizações produziram também as distribuições de velocidades exibidas na Fig. 4.6 [lá $T(t)$ está no *inset*].

estacionária $\partial\Theta/\partial t = 0$ da equação de Vlasov fornece [80]:

$$\Theta(\theta) = \Theta_n \exp\left[\frac{1}{T}(M_x \cos\theta + M_y \sin\theta)\right] = \Theta_n \exp\left[\frac{M}{T} \cos(\theta - \varphi)\right] \quad (4.16)$$

$\Theta_n = 1/[2\pi I_0(M/T)]$ é a constante de normalização [logo $\Theta(\theta) = 1/[2\pi I_0(0)] = 1/2\pi$ se $M = 0$] e φ é a fase do vetor magnetização \mathbf{M} [arbitrária devido à invariância rotacional do sistema; pela Eq. (4.5): $\mathbf{M} = M_x \hat{\mathbf{x}} + M_y \hat{\mathbf{y}} = M(\cos\varphi \hat{\mathbf{x}} + \sin\varphi \hat{\mathbf{y}})$]. Em harmonia com os demais resultados analíticos de equilíbrio do modelo, há indicativos de que a solução (4.16) se estenda a $0 \leq \alpha < 1$ [140, 141]. Trabalhando com $U = 0.69$, vem $M/T = M_{\text{BG}}/T_{\text{BG}} = 0.6496\dots$, pelas Eqs. (4.3) e (4.4).

As Figs. 4.24 e 4.25 exibem as distribuições dos ângulos para $(U, N) = (0.69, 1\,000\,000)$ e dois valores do parâmetro α [$\alpha = 0.90$ e $\alpha = 2.0$] construídas com dados provenientes das mesmas realizações numéricas que resultaram nas distribuições de velocidades da Fig. 4.6. A evolução temporal da temperatura cinética $T(t)$ e do módulo do vetor magnetização $M(t)$ dessas duas realizações são mostradas na Fig. 4.23.

Nos painéis superiores (a) e (b) da Fig. 4.24 vemos a representação periódica no intervalo $[-\pi, \pi]$ de dados correspondentes a *um único registro* dos ângulos no instante $t = 500\,000$ [bem depois do QSS para $\alpha = 0.9$, como mostra a Fig. 4.23]. Para $\alpha = 2.0$, esse registro único produz uma distribuição uniforme, resultado condizente com a magnetização $M(t) \approx 0$ observada na simulação. Para $\alpha = 0.90$, temos $M(t) \approx M_{\text{BG}}$ e $T(t) \approx T_{\text{BG}}$ após o QSS, e a distribuição apresenta bom acordo com a Eq. (4.16). A fase φ , que reflete o movimento do vetor $\mathbf{M}(t)$, foi ajustada a partir do histograma e depende do instante t no qual o registro dos ângulos foi feito [especificamente no instante t considerado, $\varphi \approx 0.2 \text{ rad} \approx 11^\circ$]. Os painéis inferiores (c) e (d) exibem as mesmas distribuições representadas de forma não periódica. Embora a solução numérica das equações de movimento forneça valores ilimitados $\theta_i(t) \in (-\infty, +\infty) \forall i$, a dinâmica do sistema é restrita ao intervalo $[-\pi, \pi]$,

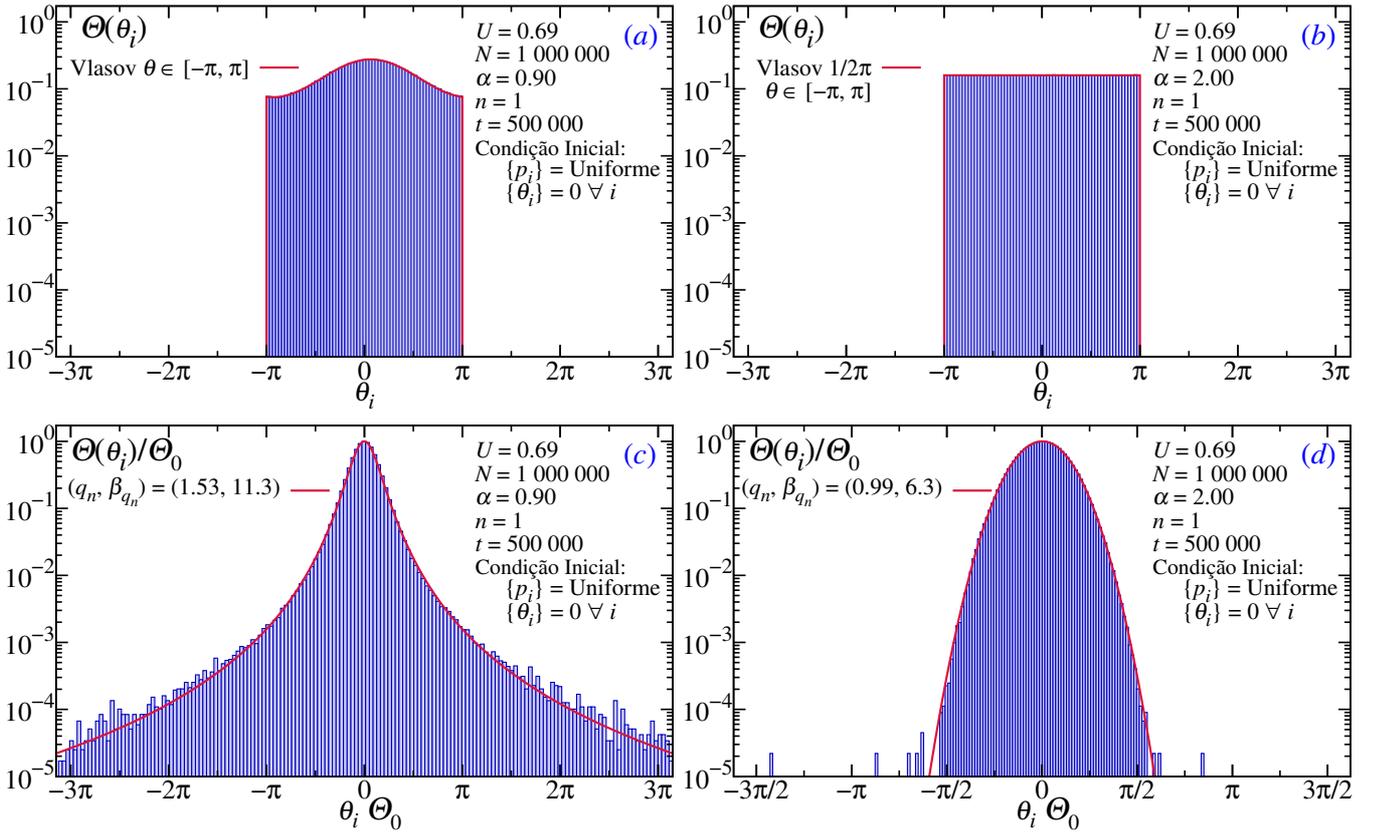


Fig. 4.24: Distribuições construídas com um único registro dos ângulos no instante $t = 500\,000$ para $(U, N) = (0.69, 1\,000\,000)$ e dois valores de α . **Acima:** Representação periódica no intervalo $[-\pi, \pi]$. Para $\alpha = 0.90$ [painel (a)], $(M(t), T(t)) \approx (T_{\text{BG}}, M_{\text{BG}})$ em $t = 500\,000$ [cf. Fig. 4.23] e a distribuição é bem descrita pela Eq. (4.16) [a fase φ foi ajustada]. Para $\alpha = 2.00$ [painel (b)], a magnetização é nula e os ângulos se distribuem uniformemente. **Abaixo:** Representação ilimitada dos mesmos dados anteriores. Neste caso, a distribuição é bem ajustada por uma q -gaussiana com $q_n \approx 1.5$ se $\alpha = 0.90$ [painel (c)], ou por uma Gaussiana se $\alpha = 2.00$ [painel (d)]. A normalização pelos respectivos valores máximos Θ_0 pode gerar uma falsa impressão sobre a rotação dos spins. Os mesmos histogramas não normalizados teriam abscissas da ordem de $\theta_{\text{max}} \approx \pm 4 \times 10^5 \pi$ para $\alpha = 0.90$ e de $\theta_{\text{max}} \approx \pm 10^5 \pi$ para $\alpha = 2.00$.

já que θ aparece apenas como argumento das funções seno e cosseno. Uma representação ilimitada no entanto, é relevante porque retrata a rotação contínua dos spins no decorrer da evolução, evidenciando características do espaço de velocidades. Nessa representação, $\alpha = 2.0$ resulta em uma Gaussiana. Porém, quando $\alpha = 0.90$, a distribuição é bem ajustada por uma q -gaussiana com $q_n \approx 1.5$ [resultado análogo foi observado na Ref. [142] com $\alpha = 0$]. Esse comportamento pode ser interpretado lembrando que $\theta_i(t)$, em um determinado instante t após $t = 0$, é associado pela dinâmica à soma de $p_i(t)$ sobre o período $\Delta t = t - 0$. Com efeito, partindo da equação de movimento $\dot{\theta}_i = \partial \mathcal{H} / \partial p_i = p_i$, vem, em primeira ordem, $\theta_i(t) = \int_0^t p_i(t) dt \approx \sum p_i(k\delta t) \delta t$ para δt pequeno. Comparando com a Eq. (4.9) que define a média \bar{p}_i , concluímos que $\theta_i(t) \approx n \bar{p}_i$ quando $\tau \approx \delta t$. Daí a semelhança entre as distribuições construídas com um único registro dos ângulos no instante t e as distribuições de velocidades calculadas sobre Δt exibidas na Fig. 4.6 mais acima, tanto para $\alpha = 0.90$ quanto para $\alpha = 2.0$. Também, nessa representação ilimitada, as distribuições são simétricas em relação ao zero em razão da soma $\sum \theta_i(t)$ sobre os ângulos ser uma quantidade conservada da dinâmica [$N \langle \theta_i \rangle = \sum \theta_i(t) = \sum \theta_i(0) = 0$].

A Fig. 4.25 exhibe a representação ilimitada da média temporal dos ângulos $\bar{\theta}_i$'s calculada sobre

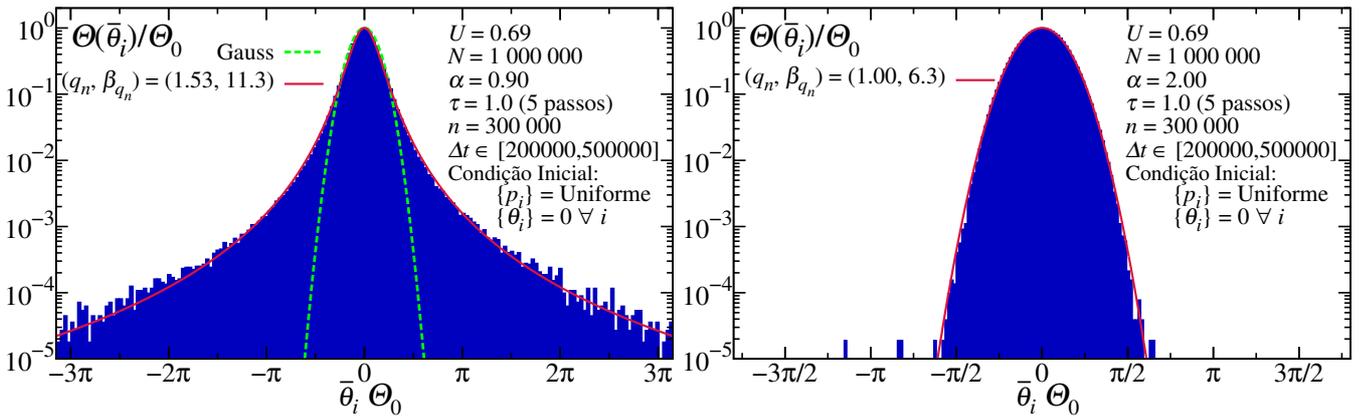


Fig. 4.25: Representação ilimitada da média temporal dos ângulos calculada sobre o período $\Delta t = 300\,000$ [região demarcada na Fig. 4.23]. Tanto para $\alpha = 0.90$ quanto para $\alpha = 2.0$, as distribuições são similares às obtidas de um único registro no instante $t = 500\,000$ [cf. Fig. 4.24 acima]. Estas distribuições foram construídas exatamente sob as mesmas condições que resultaram nas distribuições de \bar{p}_i exibidas na Fig. 4.6.

o período $\Delta t = 300\,000$ demarcado na Fig. 4.23 usando $\tau = 1.0$ como intervalo entre medições sucessivas [período Δt e intervalo τ idênticos aos que resultaram nos histogramas da Fig. 4.6]. Como se pode observar, as distribuições são similares às construídas com um único registro no instante t : q -gaussiana com $q_n \approx 1.5$ quando $\alpha = 0.90$, e Gaussiana quando $\alpha = 2.0$. É possível novamente uma associação entre as médias $\bar{\theta}_i$ e \bar{p}_i , mas é natural uma interpretação envolvendo correlações. Para $\alpha = 2.0$ [curto alcance], a receita do Teorema do Limite Central produz uma Gaussiana, indicando que as variáveis $\theta_i(k\tau)$'s estão, ao longo do tempo $t = k\tau$, fracamente correlacionadas no sentido discutido na Sec. 4.5. Já quando $\alpha = 0.90$ [longo alcance], o formato q -gaussiano sugere correlações que satisfaçam a generalização q -CLT. Merece atenção a similaridade entre essas distribuições construídas com as médias temporais $\bar{\theta}_i$'s cobrindo o período Δt e aquelas provenientes de um único registro dos ângulos $\theta_i(t)$'s no instante t , resultado não observado com as distribuições de velocidades quando $\alpha < 1$. A coincidência entre média e registro único pode ser associada a ergodicidade. Entretanto, o bom ajuste oferecido pela q -gaussiana reforça a tese lançada na Ref. [50] de que a mecânica estatística não extensiva pode ser necessária para uma descrição completa do modelo α -XY no regime de longo alcance.

4.14 q de Primeiros Princípios

Esperamos que o índice q do funcional entrópico S_q seja uma propriedade intrínseca do modelo, relacionado com a natureza geométrica da ocupação do espaço de fases. Deve, portanto, ser calculado de primeiros princípios, a partir das leis microscópicas fundamentais que governam o sistema. Tal cálculo de maneira alguma pode ser visto como uma tarefa fácil. Sem lançar mão de aproximações matemáticas suficientemente fortes, em muitos casos, é uma tarefa virtualmente impossível.

Para o modelo α -XY, o parâmetro q deve ser obtido da função Hamiltoniana (4.1). Motivados pelo formato q -gaussiano da distribuição de velocidades observado nas simulações, podemos aventar uma rota para o cálculo de q de primeiros princípios. A distribuição q -gaussiana extremiza a entropia não aditiva S_q sobre a qual a mecânica estatística não extensiva é construída. Nesse contexto, e de maneira análoga à mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs, é esperado que o estado estacionário seja descrito por uma distribuição de probabilidade da forma $\exp_q[-\beta_q \mathcal{H}]/Z_q$, em que Z_q representa

a função de partição generalizada, conforme discutido no Cap. 1. A distribuição marginal de uma partícula seria então calculada usando $P(p_1) = \int dp_2 \dots dp_N d\theta_1 \dots d\theta_N \exp_q[-\beta_q \mathcal{H}]/Z_q$, cujo resultado poderia ser uma q_m -gaussiana $P(p_1) \propto \exp_{q_m}[-\beta_{q_m} p_1^2/2]$, com m respondendo por *momento*. É importante particularizar q_m neste ponto porque ele não é necessariamente igual ao q da entropia S_q — evidentemente esperamos $q_m = 1$ quando $q = 1$ [a propósito, ver discussão sobre o q -tripleto na Ref. [10], Cap. 5]. O esforço computacional presente permite acessar apenas $q_m \approx q_n$. Acessar q implicaria avaliar a ocupação do espaço de fases completo, tarefa computacional extremamente pesada para sistemas Hamiltonianos de muitos corpos [viável com mapas de baixa dimensionalidade, *e.g.*, [23, 143]]. Uma abordagem estritamente analítica para determinar $P(p_1)$ envolveria o cálculo de Z_q [por exemplo, expandindo $q = 1 + \epsilon_1$ quando $\alpha = 1 - \epsilon_2$], tarefa tentada sem sucesso [viável em sistemas mais simples, alguns sabidamente Boltzmannianos, *e.g.*, [144]]. Esperamos que o índice entrópico seja uma função $q = q(\alpha/d)$, possivelmente caracterizando classes de universalidade, diferente de $q = 1$ na região de longo alcance $0 \leq \alpha/d \leq 1$ e igual a 1 na de curto alcance $\alpha/d > 1$, em harmonia com o comportamento de q_n observado nos experimentos numéricos.

O modelo α -XY tem dinâmica muito rica e certamente continuará proporcionando novos e instigantes resultados. O fato do escalamento do potencial por \tilde{N} recuperar formalmente a extensividade mas não eliminar a natureza intrínseca de longo alcance da interação, aparentemente é a razão pela qual o sistema não é completamente descrito pela termoestatística tradicional. Os fenômenos incomuns observados, principalmente quando $\alpha/d < 1$, são consistentes com quebra de ergodicidade e com a tese da q -generalização do Teorema do Limite Central. É concebível que o longo alcance da interação seja capaz de gerar correlações fortes o suficiente para restringir a dinâmica do sistema a determinada região do espaço de fases, reduzindo, assim, o “número” de microestados acessíveis, de modo que um funcional entrópico diferente de S_{BG} seja necessário para que a conexão com a termodinâmica seja adequadamente realizada, no mesmo espírito das *classes de correlação* que discutiremos no Cap. 6 mais à frente.

Existe a crítica de que o índice q é simplesmente um parâmetro de ajuste, um parâmetro de *fitting*, sem qualquer significado físico [145–149]. Tal objeção à mecânica estatística não extensiva é superficial. Esta teoria é baseada na proposição de um novo funcional para a entropia microscópica, que generaliza o funcional de Boltzmann-Gibbs S_{BG} . Como consequência, deriva-se, por exemplo, uma distribuição de velocidades cujo formato é uma q -gaussiana, que no limite $q \rightarrow 1$ recupera a tradicional distribuição Maxwelliana, derivável por meio de S_{BG} . Através de experimentos, distribuições de velocidades são medidas, ajustadas com uma q -gaussiana, e o parâmetro q surge como parâmetro de *fitting*. Newton propôs que a interação entre duas massas depende do inverso do quadrado da distância. Como consequência, órbitas limitadas em um campo central são elípticas. Observando um objeto com movimento ditado por um campo central em três instantes distintos, os elementos orbitais podem ser calculados pelos engenhosos métodos de Laplace ou Gauss [150]. Ignorando esses métodos, dados de uma série de observações podem ser ajustados por uma elipse [procedimento de Kepler], a excentricidade então, por exemplo, surge como parâmetro de *fitting*[¶]. Além de superficial, atualmente é errado considerar q um mero parâmetro de *fitting*. Apesar de

[¶]Analogia inspirada na Ref. [32]. Onde também se lê: “*it is thinkable that, like any other theory, it [a q -estatística] could be wrong, but definitively not incomplete!*” [incompleta no sentido de ter um parâmetro acessível apenas através de *fitting*].

todas as dificuldades subjacentes, cálculos analíticos de primeiros princípios de q para alguns sistemas estão disponíveis, como ocorre com a cadeia ferromagnética quântica de spins 1/2 analisada por Caruso & Tsallis na Ref. [151] e apresentada brevemente na próxima seção.

4.14.1 Um Exemplo Quântico

Quando lidamos com sistemas clássicos, correlação espacial e memória estão normalmente conectadas ao alcance da interação. Entretanto, voltando a atenção à estrutura microscópica da matéria, o fenômeno estritamente quântico do emaranhamento torna-se relevante e correlações de longo alcance passam a não estar necessariamente ligadas ao alcance da interação no sentido clássico comentado no Cap. 3. Por exemplo, consideremos a cadeia quântica unidimensional de spin 1/2 descrita pelo seguinte Hamiltoniano em que apenas spins vizinhos interagem:

$$\hat{H} = - \sum_{i=1}^{N-1} [(1 + \gamma) \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + (1 - \gamma) \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + 2\lambda \sigma_i^z] \quad (4.17)$$

σ^μ , $\mu = x, y, z$, são as matrizes de Pauli, o parâmetro γ , $-1 \leq \gamma \leq 1$, controla a intensidade da anisotropia, e λ representa o campo magnético transversal externo. Conhecido como modelo XY quântico, o Hamiltoniano (4.17) recupera quando $|\gamma| = 1$ [*i.e.*, máxima anisotropia] o modelo de Ising quântico. No limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, uma transição de fase quântica associada ao ponto crítico $|\lambda_c| = 1$ ocorre à temperatura $T = 0$.

Dispondo de informação completa sobre um sistema, sua entropia é zero. Em mecânica quântica, informação completa significa lidar com um estado puro. Evidentemente a natureza probabilística intrínseca de sistemas quânticos proíbe informação completa no sentido clássico, de modo que um estado puro significa que existe um único estado quântico descrevendo o sistema. À temperatura nula, o sistema encontra-se em seu estado fundamental, um estado puro, e a entropia calculada por qualquer funcional entrópico admissível deve ser zero. Denotando por $\hat{\rho}_N$ o operador densidade da cadeia completa contendo N spins, estado puro significa que $\text{Tr} \hat{\rho}_N^2 = \text{Tr} \hat{\rho}_N = 1$. Entretanto, mesmo quando $T = 0$, é possível calcular uma entropia diferente de zero considerando um bloco de $L < N$ spins contíguos e trabalhando com a respectiva matriz reduzida $\hat{\rho}_L = \text{Tr}_{N-L} \hat{\rho}_N$, obtida por meio do traço parcial sobre $(N-L)$ spins. Como consequência do emaranhamento, efeito quântico não local responsável pela correlação de longo alcance da cadeia (4.17), a matriz reduzida geralmente não representa um estado puro, mas sim uma mistura estatística em que $\text{Tr} \hat{\rho}_L^2 < \text{Tr} \hat{\rho}_L = 1$. No estado fundamental, o grau de emaranhamento entre o bloco de tamanho L e o restante da cadeia pode ser caracterizado pela entropia de von Neumann do bloco $S_{\text{BG}}(L) = -k_B \text{Tr}[\hat{\rho}_L \ln \hat{\rho}_L]$ [*i.e.*, a entropia de Boltzmann-Gibbs adequadamente adaptada a sistemas quânticos]. Para um bloco de tamanho L suficientemente grande, a entropia de von Neumann escala logarithmicamente com L no ponto crítico. Em outras palavras: a entropia de Boltzmann-Gibbs da cadeia (4.17) à temperatura $T = 0$ e $\lambda = \lambda_c$ não é extensiva, não escala com o tamanho do sistema, mas sim como $S_{\text{BG}}(L) \propto \ln L$. Afastando-se da criticalidade, $S_{\text{BG}}(L)$ atinge um valor constante, recuperando o resultado conhecido como *lei da área* para sistemas unidimensionais, cuja extensão para dimensões maiores é $S_{\text{BG}}(L) \propto L^{d-1}$, expressão que representa o escalamento geral da lei da área para sistemas d -dimensionais com $d \geq 2$ [trabalhos de revisão sobre o tema [152, 153]].

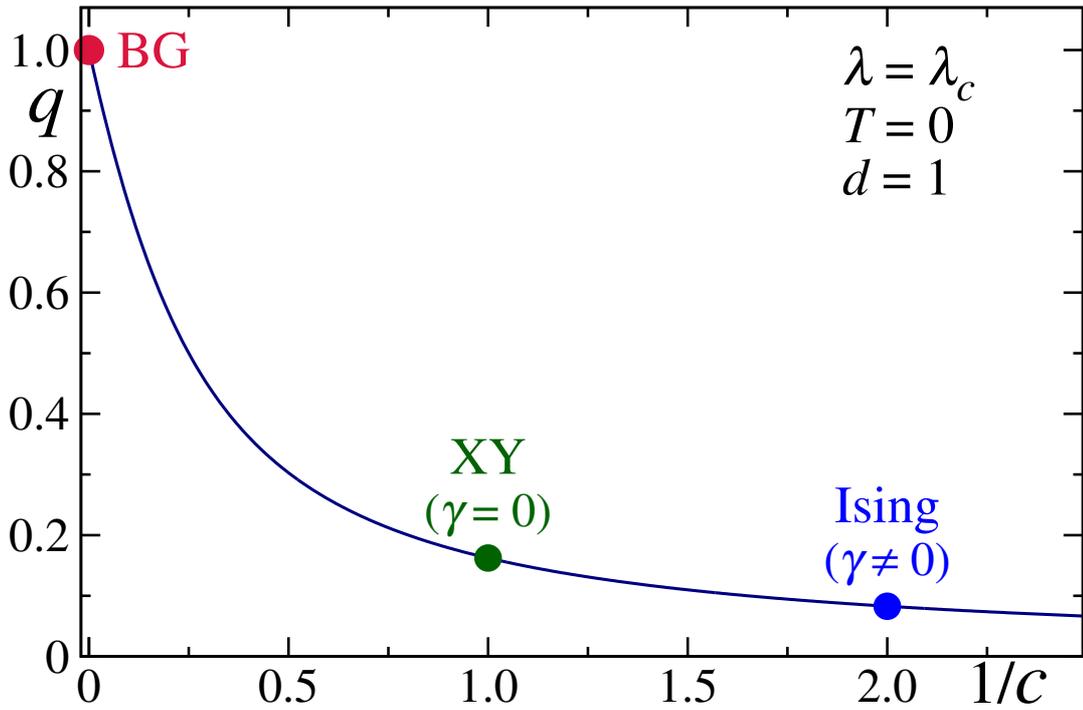


Fig. 4.26: q como função da carga central c conforme Eq. (4.18). No ponto crítico em dimensão $d=1$, a entropia de Boltzmann-Gibbs do Hamiltoniano (4.17) para um bloco de L spins contíguos não é extensiva, não escala com o tamanho do sistema L , mas logaritmicamente, $S_{\text{BG}}(L) \propto \ln L$. Entretanto, empregando os valores de q contidos nesta curva, a extensividade é recuperada com S_q : $S_q(L) \propto L \Rightarrow 0 < \lim_{L \rightarrow \infty} S_q(L)/L < \infty$. A carga central caracteriza classes de universalidade de modo que o resultado (4.18) abarca um conjunto de modelos quânticos. Por exemplo, para $c=1/2$ temos o modelo de Ising e o XY anisotrópico [$\gamma \neq 0$], quando $c=1$ temos o modelo XY isotrópico [$\gamma=0$]. Este resultado foi obtido e é discutido em detalhes na Ref. [151].

Para o caso unidimensional, foi mostrado [151] que a extensividade da entropia do bloco $S_{\text{BG}}(L)$ é recuperada trocando o funcional entrópico $S_{\text{BG}}(L) = -k_B \text{Tr}[\hat{\rho}_L \ln \hat{\rho}_L]$ por $S_q(L) = k_B [1 - \text{Tr} \hat{\rho}_L^q] / [q - 1]$ e empregando um valor particular de q . Para o Hamiltoniano (4.17) em dimensão $d=1$, é possível derivar uma expressão para $\text{Tr} \hat{\rho}_L^q$ válida para uma cadeia infinita [$N \rightarrow \infty$] crítica. A partir deste resultado, exigindo-se que a entropia seja extensiva, *i.e.*, $S_q(L) \propto L$, é imediato calcular analiticamente esse valor particular de q em função da carga central c :

$$q = \frac{\sqrt{9 + c^2} - 3}{c} \quad (4.18)$$

Portanto, a fim de obter uma entropia extensiva, e conseqüentemente um valor finito da razão $S(L)/L$ no limite $L \rightarrow \infty$, é suficiente calcular S_q com o valor específico de q fornecido pela Eq. (4.18) [ver também a Ref. [154] com análise similar com outros modelos]. O resultado (4.18) é válido para a classe de universalidade caracterizada pela carga central c [155]. Particularmente para $c=1/2$ [Ising, XY anisotrópico, mesma classe de universalidade] vem $q = \sqrt{37} - 6 \approx 0.083$, um número bem menor do que $q=1$. Para $c \rightarrow \infty$, o valor Boltzmanniano $q=1$ é recuperado; não há, entretanto, um entendimento completo deste resultado. A Fig. 4.26 exhibe o comportamento de q em função de c .

Capítulo 5

Rotores de Heisenberg ($n = 3$)

Este capítulo é dedicado ao modelo clássico de spins interagentes α -Heisenberg. O principal objetivo é investigar o comportamento do estado quase estacionário (QSS) em função do parâmetro α , da energia U e do número de partículas N . O enfoque é predominantemente numérico [dinâmica molecular] e grande parte dos resultados apresentados podem ser acessados também na Ref. [4].

5.1 Modelo α -Heisenberg

O modelo α -Heisenberg é definido como o caso particular $n=3$ da Eq. (2.5). A função Hamiltoniana do sistema pode ser escrita como [adotando $J=1$]:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \mathbf{L}_i^2 + \frac{1}{2\tilde{N}} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1 - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{r_{ij}^\alpha} = K + V \quad (\alpha \geq 0) \quad (5.1)$$

Cada rotor \mathbf{S}_i fixo na posição \mathbf{r}_i da rede pode variar continuamente a direção em um esfera de raio unitário. Agora, escreveremos \mathbf{L}_i no lugar de \mathbf{p}_i porque o momento será interpretado explicitamente como momento angular, e, por razões ligadas à estrutura das equações de movimento, não expressaremos o vínculo $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_i = 1$ em função dos ângulos esféricos θ_i e φ_i .

Em dimensão $d = 1$ considerando condições periódicas de contorno, os spins estão dispostos num anel e as distâncias [adimensionais] entre eles são $r_{ij} = 1, 2, 3, \dots, N/2$ — exatamente como no modelo α -XY discutido no Cap. 4. Nesta situação unidimensional sob condições periódicas, novamente o foco de nossas simulações, a constante \tilde{N} , dependente da dimensionalidade d da rede mas não da dimensionalidade n do spin \mathbf{S}_i , tem a mesma forma exibida na Eq. (4.2). Repito:

$$\tilde{N} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1}{r_{ij}^\alpha} = \frac{1}{(N/2)^\alpha} + 2 \sum_{m=1}^{N/2-1} \frac{1}{m^\alpha} = \begin{cases} N-1 & \text{se } \alpha = 0 \\ 2 & \text{se } \alpha \rightarrow \infty \end{cases} \quad (d = 1) \quad (5.2)$$

Denotando o potencial na Eq. (5.1) por $V(\alpha)$, seus dois extremos [$\alpha = 0$, sistema globalmente acoplado, e $\alpha \rightarrow \infty$, interação entre primeiros vizinhos] se escrevem:

$$V(0) = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [1 - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j]; \quad \lim_{\alpha \rightarrow \infty} V(\alpha) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N [1 - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}] \quad (d = 1, \mathbf{S}_{N+1} = \mathbf{S}_1)$$

As soluções canônicas de equilíbrio são obtidas com $n=3$ nas Eqs. (2.13) e (2.14), Pág. 15. Neste

caso, a energia interna é dada por [adotando $k_B = 1$]:

$$U(M, T) = \begin{cases} T + \frac{1}{2} [1 - M^2] & \text{para } 0 \leq \alpha < d = 1 \\ T + \frac{1}{2} [1 - L(1/2T)] & \text{para } \alpha \rightarrow \infty \text{ e } d = 1 \end{cases} \quad (5.3)$$

e a magnetização por:

$$M(T) = \begin{cases} M = L(M/T) & \text{para } 0 \leq \alpha < d = 1 \\ M = 0 & \text{para } \alpha \rightarrow \infty \text{ e } d = 1 \end{cases} \quad (5.4)$$

com $L(x)$ representando a função de Langevin:

$$L(x) = \coth x - \frac{1}{x} = \frac{I_{3/2}(x)}{I_{1/2}(x)}$$

Os valores críticos associados à região de longo alcance $0 \leq \alpha < 1$ são $[T_c, U_c] = [1/3, 5/6]$, conforme Eq. (2.11). Essas soluções estão representadas graficamente na Fig. 5.1 a seguir. O parâmetro de ordem M é a magnitude do vetor magnetização, $M = |\langle \mathbf{M} \rangle|$. Escrevendo o spin \mathbf{S}_i em componentes Cartesianas, $\mathbf{S}_i = (S_{x_i}, S_{y_i}, S_{z_i})$, o vetor \mathbf{M} é calculado microscopicamente como:

$$\mathbf{M} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [S_{x_i} \hat{\mathbf{x}} + S_{y_i} \hat{\mathbf{y}} + S_{z_i} \hat{\mathbf{z}}] = M_x \hat{\mathbf{x}} + M_y \hat{\mathbf{y}} + M_z \hat{\mathbf{z}} \quad (5.5)$$

As soluções de equilíbrio dos modelos α -XY e α -Heisenberg são qualitativamente similares. Graças à condição inicial adotada [descrita adiante], há muitos pontos em comum também na evolução temporal da temperatura cinética $T(t)$ e da magnetização $M(t)$, especialmente em relação ao estado quase estacionário (QSS). Como ocorre com os rotores XY, as simulações do sistema (5.1) revelam que no regime de longo alcance $0 \leq \alpha \leq 1$ e determinada faixa de energia, os rotores de Heisenberg também atingem um estado persistente temporalmente, cuja duração depende do tamanho N , no qual os valores de temperatura e magnetização diferem daqueles derivados pela mecânica estatística tradicional. Para N finito, após um período suficientemente longo o sistema abandona este regime meta estável e relaxa para o equilíbrio, alcançando os valores de T e M previstos pelas Eqs. (5.3) e (5.4). Agora, um estudo sistemático em função da energia será realizado, de modo que denotaremos por T_{BG} e M_{BG} os valores de equilíbrio associados ao intervalo $0 \leq \alpha < 1$, e por T_∞ aqueles associados a $\alpha \rightarrow \infty$, independentemente da energia U . Novamente, o QSS investigado é caracterizado por magnetização nula em ampla faixa de energia abaixo da energia crítica U_c . Dentro desta faixa, a temperatura $T(t)$ em função de U observada nas simulações coincide com o prolongamento analítico $T = T_{QSS} = U - 1/2$, obtido violando-se a solução (5.3) na região de longo alcance impondo $M = M_{QSS} = 0$ para qualquer energia. Essa breve descrição será ilustrada numericamente em detalhes nas seções subsequentes.

Diferentemente do modelo α -XY discutido no capítulo anterior, rotores inerciais de Heisenberg com interação de longo alcance foram bem menos investigados na literatura [todos os exemplos

conhecidos [4, 38, 156, 157]]. Seu comportamento durante o estado estacionário levanta questões relevantes [*e.g.*, quebra de ergodicidade, calor específico negativo], questões igualmente levantadas pelo modelo α -XY. Entretanto, por ter mais graus de liberdade, o α -Heisenberg pode se mostrar um laboratório capaz de oferecer conclusões mais gerais — neste sentido, o presente trabalho é apenas um dos passos iniciais.

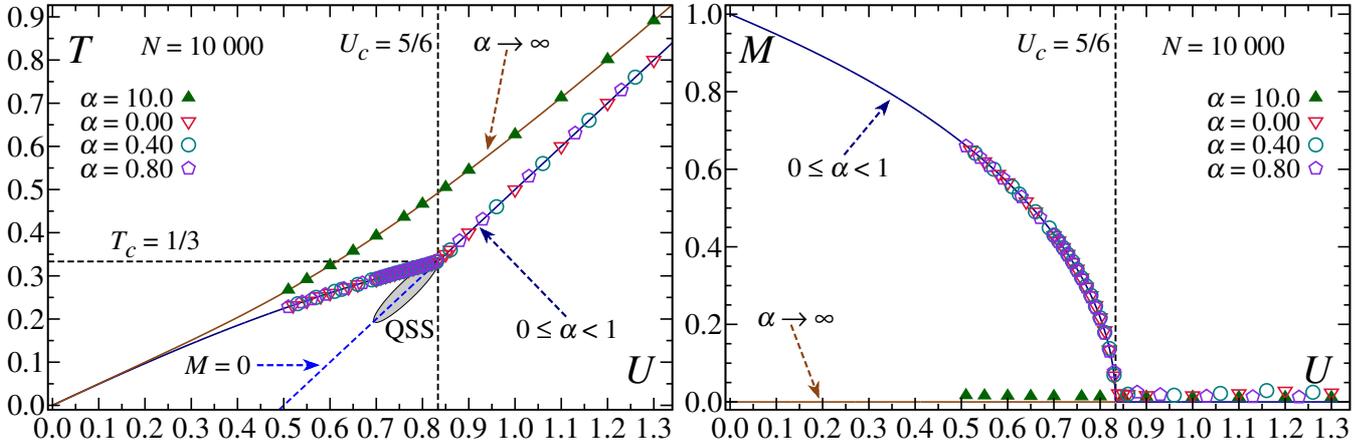


Fig. 5.1: **Linhas:** Solução analítica do modelo α -Heisenberg unidimensional para $0 \leq \alpha < 1$ e $\alpha \rightarrow \infty$ [cf. Eqs. (5.3) e (5.4)]. No gráfico T vs. U é representado o prolongamento para energias $U < U_c$ da curva correspondente à solução na região de longo alcance considerando-se $M = 0$ [função $T = U - 1/2$, $M = 0$ na Eq. (5.3)]. Sobre este prolongamento há a região sombreada indicada com QSS, demarcando a faixa de energia $U \in [0.70, U_c]$ associada a estados quase estacionários de magnetização nula observados nas simulações. **Pontos:** Os valores numéricos são médias temporais calculadas após o QSS. Para $\alpha > 1$ não detectamos QSS's de duração apreciável, e quando $\alpha = 10 \gg 1$, os resultados numéricos são muito bem descritos pela curva correspondente ao modelo com $\alpha \rightarrow \infty$ [desconhecemos solução analítica nesta região intermediária entre $1 \leq \alpha < \infty$]. Para $\alpha < 1$, após o QSS, médias temporais concordam com os resultados analíticos associados à região de longo alcance. Todos os valores canônicos, T_{BG} , T_∞ e M_{BG} , foram observados com bastante precisão em simulações com N grande. Os resultados numéricos correspondem a $N = 10\,000$, e as médias temporais foram calculadas sobre a evolução de uma única realização do sistema (5.1); são resultados restritos a $U > 0.50$ em virtude da condição inicial adotada. Para $\alpha < 1$, médias temporais durante o QSS coincidem com o prolongamento de magnetização nula caso $0.70 \lesssim U < U_c$, e, caso $U < 0.70$, o QSS tem outra característica, como exibido na Fig. 5.6 e discutido na Sec. 5.6 mais à frente. Para $U > U_c$ não há QSS para nenhum valor de α .

O modelo α -Heisenberg definido na Eq. (5.1) foi introduzido em [4]. Ele recupera, quando $\alpha = 0$, o modelo inercial de alcance infinito introduzido por Nobre & Tsallis [38], e recupera, quando $\alpha \rightarrow \infty$, o modelo inercial de primeiros vizinhos introduzido por Rapaport & Landau [158]. Neste último caso, excluindo-se o termo cinético, recaímos no modelo n -vetorial [$n = 3$] discutido no Cap. 2. Relativamente às soluções canônicas expressas nas Eqs. (5.3) e (5.4), a resposta para o caso de alcance infinito $\alpha = 0$ foi obtida na Ref. [38] e estendida para qualquer $\alpha < d$ na Ref. [39], contanto que condições periódicas de contorno fossem impostas e a quantidade \tilde{N} definida de acordo com a Eq. (5.2). Já a solução para o potencial correspondente a $\alpha \rightarrow \infty$ [$d = 1$] foi obtida por Fisher [159] considerando uma cadeia linear aberta [bordas livres], resposta, no limite $N \rightarrow \infty$, idêntica a de uma cadeia periódica, como mostrou Joyce [67] poucos anos depois [a solução de Fisher havia sido derivada mais de 10 anos antes por Nakamura [160], como Stanley [34] apontou]. Lembrando: na região $1 \leq \alpha < \infty$, não há solução analítica de nosso conhecimento.

5.2 Equações de Movimento

Trabalhando com o vetor de spin $\mathbf{S}_i = (S_{x_i}, S_{y_i}, S_{z_i})$ e o momento angular $\mathbf{L}_i = (L_{x_i}, L_{y_i}, L_{z_i})$ em coordenadas Cartesianas, cada rotor é descrito por 6 variáveis. As $6N$ equações de movimento podem ser escritas então como [158]:

$$\dot{\mathbf{L}}_i = \mathbf{S}_i \times \left[\frac{1}{\tilde{N}} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mathbf{S}_j}{r_{ij}^\alpha} \right]; \quad \dot{\mathbf{S}}_i = \mathbf{L}_i \times \mathbf{S}_i; \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (5.6)$$

No caso particular $\alpha = 0$, a expressão para $\dot{\mathbf{L}}_i$ acima se reduz a $\dot{\mathbf{L}}_i = \mathbf{S}_i \times \mathbf{M}$, recuperando as equações de movimento usadas nos trabalhos anteriores [38, 156].

As Eqs. (5.6) não representam equações canônicas de movimento, pois S_{μ_i} e L_{μ_i} [$\mu = x, y, z$] não são pares canonicamente conjugados entre si. Poderíamos, na mesma linha das Refs. [157, 161], empregar coordenadas esféricas e escrever o vetor de spin como $\mathbf{S}_i = (\cos \varphi_i \sin \theta_i, \sin \varphi_i \sin \theta_i, \cos \theta_i)$, o momento angular como $\mathbf{L}_i^2 = L_{\theta_i}^2 + L_{\varphi_i}^2 / \sin^2 \theta_i$, e então derivar equações de movimento por meio do formalismo Hamiltoniano como no Cap. 4. Nesta representação, cada rotor é caracterizado pelos ângulos $\theta_i \in [0, \pi)$ e $\varphi_i \in [0, 2\pi)$ e seus respectivos momentos canônicos conjugados L_{θ_i} e L_{φ_i} . Embora empregar coordenadas esféricas aparente ser o caminho natural de abordar o problema, o $\sin^2 \theta_i$ que surge no denominador de \mathbf{L}_i^2 gera dificuldades numéricas importantes. De fato, conforme θ_i se aproxima de zero [mais precisamente, de $n\pi$, com $n = 0, 1, 2, \dots$], quantidades dependentes de $1/\sin^2 \theta_i$ começam a variar rapidamente e um passo de integração muito pequeno deve ser usado a fim de que a dinâmica seja adequadamente descrita. Este tipo de instabilidade numérica foi percebida por Barojas *et al.* [162] em simulações de moléculas diatômicos. Na ocasião, os autores a contornaram introduzindo dois referenciais fixos e trocando a representação de θ_i e φ_i entre eles sempre que $0 < \theta_i < \frac{1}{10}\pi$ ou $\frac{9}{10} < \theta_i < \pi$. Uma solução geral foi proposta alguns anos depois por Evans [163, 164], que foi capaz de escrever equações de movimento livres de singularidades utilizando quaternions como coordenadas generalizadas[¶]. É possível evitar essas sofisticacões numéricas e escrever as equações de movimento na forma relativamente simples vista nas Eqs. (5.6) porque a Hamiltoniana (5.1) representa rotores rígidos de comprimento unitário, ou, usando a expressão mais comum na literatura que trata o assunto, moléculas lineares rígidas, cada qual com um dos momentos principais de inércia nulo e os outros dois iguais [e.g., $I_3 = 0$ e $I_1 = I_2$], havendo apenas dois graus de liberdade rotacionais [o spin não gira em torno do eixo definido pela direção de \mathbf{S}_i , o “eixo molecular”, relacionado a I_3]. Em sistemas assim, a velocidade angular $\boldsymbol{\omega}_i$ e o torque [igual a $\mathbf{S}_i \times \mathbf{M}$ se $\alpha = 0$] são perpendiculares ao vetor \mathbf{S}_i , logo, adotando momento de inércia unitário, $\mathbf{L}_i = \boldsymbol{\omega}_i$ em qualquer sistema de eixos.

Além da energia total, é imediato verificar que a norma de cada spin $S_i = [\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_i]^{1/2}$ e o momento angular total $\mathbf{L} = \sum \mathbf{L}_i$ também são integrais de movimento. Com efeito, derivando S_i com respeito ao tempo e levando em conta que $\dot{\mathbf{S}}_i \perp \mathbf{S}_i$, vem:

$$\frac{dS_i}{dt} = \frac{\dot{\mathbf{S}}_i \cdot \mathbf{S}_i}{S_i} = 0 \quad \text{para} \quad i = 1, 2, \dots, N$$

[¶]Remetemos o leitor ao Cap. 3 de Allen & Tildesley [71] para se aprofundar na discussão deste parágrafo.

Igualmente para $\dot{\mathbf{L}}$:

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \sum_{i=1}^N \dot{\mathbf{L}}_i = \frac{1}{\tilde{N}} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j}{r_{ij}^\alpha} = 0$$

A perpendicularidade entre o momento angular \mathbf{L}_i de cada rotor e o respectivo vetor \mathbf{S}_i produz o vínculo $\mathbf{L}_i \cdot \mathbf{S}_i = 0 \forall i$, que deve ser incorporado à condição inicial [descrita na próxima seção]. Impondo esse vínculo ao estado inicial, ele permanecerá preservado durante toda a evolução do sistema, uma vez que o produto $\mathbf{L}_i \cdot \mathbf{S}_i$ é também uma constante de movimento, como podemos verificar usando as Eqs. (5.6):

$$\frac{d}{dt} [\mathbf{L}_i \cdot \mathbf{S}_i] = \dot{\mathbf{L}}_i \cdot \mathbf{S}_i + \mathbf{L}_i \cdot \dot{\mathbf{S}}_i = 0 \quad \text{para} \quad i = 1, 2, \dots, N$$

5.3 Procedimento Numérico e Condições Iniciais

Repetindo exatamente o mesmo procedimento aplicado ao modelo α -XY no Cap. 4, todas as simulações da Hamiltoniana (5.1) foram realizadas em dimensão $d=1$ sob condições periódicas de contorno [sistema arranjado num anel], com um número N fixo de rotores e também com energia fixa, sem termostato, de modo que a energia total E inicialmente atribuída ao sistema [constante pois \mathcal{H} não depende explicitamente do tempo] deve ser identificada com a energia interna termodinâmica, $E/N = \langle \mathcal{H} \rangle / N = U$ para N grande [ensemble microcanônico].

Para integrar as $6N$ equações de movimento (5.6), utilizamos o tradicional esquema de Runge-Kutta de quarta ordem, escolhendo um passo de integração capaz de fornecer uma flutuação relativa da energia menor que 10^{-5} , resultado alcançado tipicamente com $\delta t = 0.02$. A construção do estado inicial envolveu as etapas: as três componentes dos momentos \mathbf{L}_i 's [$L_{\mu i}$; $\mu = x, y, z$; $i = 1, 2, \dots, N$] foram sorteadas aleatoriamente de uma distribuição uniforme no intervalo $[-1, 1]$ e depois reescaladas de modo a anular o momento angular total $\mathbf{L} = \sum \mathbf{L}_i$. Em seguida, duas componentes dos spins \mathbf{S}_i 's, S_{x_i} e S_{y_i} , foram também sorteadas de uma distribuição uniforme entre $[-1, 1]$ e a terceira calculada tal que o vínculo $\mathbf{L}_i \cdot \mathbf{S}_i = 0$ fosse satisfeito. Explicitamente: $S_{z_i} = -(L_{x_i} S_{x_i} + L_{y_i} S_{y_i}) / L_{z_i} \forall i$. Deste procedimento resulta spins não normalizados $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_i \neq 1$, que são então normalizados dividindo-se cada componente pelo módulo $|\mathbf{S}_i| = \sqrt{S_{x_i}^2 + S_{y_i}^2 + S_{z_i}^2}$ do respectivo spin. Finalmente, todas as componentes $L_{\mu i}$'s são reescaladas novamente para que a energia desejada $U = E/N$ seja atingida. A fim de ter o vínculo $\mathbf{L}_i \cdot \mathbf{S}_i = 0$ preservado, a ordem dessas etapas é importante. Essa condição inicial corresponde à magnetização $M \approx 0$ [tipicamente $M \sim 10^{-3}$ pela Eq. (5.5)] e a uma distribuição uniforme de largura $2\sqrt{2(E-V)/N}$ e média zero para as três componentes dos momentos $L_{\mu i}$'s. Tal configuração inicial de magnetização nula implica energia potencial por partícula de $V/N \approx 1/2$, restringindo a energia ao intervalo $U = E/N \gtrsim 1/2$, em consonância com as soluções canônicas (5.3) e (5.4). Todas as constantes de movimento [norma $|\mathbf{S}_i| = 1$, perpendicularidade $\mathbf{L}_i \cdot \mathbf{S}_i = 0$ e momento angular total $\mathbf{L} = 0$] foram conservadas com precisão bem maior do que a da energia no decorrer da evolução.

5.4 Temperatura e Magnetização: Evolução e Média Temporal

Embora trabalhando com três componentes Cartesianas para o momento angular $\mathbf{L}_i = (L_{x_i}, L_{y_i}, L_{z_i})$, em razão do vínculo $\mathbf{L}_i \cdot \mathbf{S}_i = 0$, apenas duas dessas componentes são independentes [$n-1=3-1=2$ graus de liberdade por rotor]. Por meio do Teorema da Equipartição da Energia, podemos então definir a temperatura cinética instantânea $T(t)$ como:

$$K(t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N [L_{x_i}^2(t) + L_{y_i}^2(t) + L_{z_i}^2(t)] = \frac{2}{2} NT(t) \Rightarrow T(t) = \frac{K(t)}{N} \quad (5.7)$$

Em outras palavras, no modelo α -Heisenberg, a temperatura $T(t)$ é simplesmente a energia cinética instantânea $K(t)$ por partícula. No equilíbrio, a média temporal de $T(t)$ deve coincidir com a temperatura termodinâmica, $\langle T(t) \rangle_{\text{Tempo}} = T$, resultado válido também para a magnetização, $\langle M(t) \rangle_{\text{Tempo}} = M$, sendo o vetor magnetização $\mathbf{M}(t)$ ao longo do tempo calculado de acordo com a Eq. (5.5), donde $M(t) = |\mathbf{M}(t)| = \sqrt{M_x^2(t) + M_y^2(t) + M_z^2(t)}$.

A Fig. 5.2 exhibe a evolução da temperatura cinética $T(t)$ para U e N fixos e diversos valores de α . Como ocorre com o modelo α -XY, a fim de coincidir com o resultado canônico das Eqs. (5.3) e (5.4), as médias temporais precisam ser calculadas após o sistema atravessar o estado quase estacionário, quando $T(t)$ e $M(t)$ flutuam próximos aos valores preditos pela mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs. Neste regime, no qual é esperado que a hipótese ergódica se aplique, médias temporais e de ensemble devem coincidir.

Mais acima na Fig. 5.1, para diversas energias abaixo e acima de $U_c = 5/6$, e para $\alpha = 0.0, 0.4, 0.8$ e $\alpha = 10.0$ [*i.e.*, três valores típicos dentro da região de longo alcance, e um bem além da fronteira $\alpha = d = 1$], médias temporais calculadas *após* o QSS são exibidas, o acordo com as previsões analíticas para todas as energias analisadas é muito bom. Para os três valores de α entre $0 \leq \alpha < 1$, os experimentos numéricos reproduzem os valores de T e M correspondentes à solução neste intervalo, e, para $\alpha = 10$, são muito bem descritos pela solução associada ao modelo com $\alpha \rightarrow \infty$. No gráfico T vs. U da Fig. 5.1 é exibido também o prolongamento $T = T_{\text{QSS}} = U - 1/2$ da solução analítica na região de longo alcance, obtido impondo $M = M_{\text{QSS}} = 0$ para qualquer energia na Eq. (5.3). Foi essencialmente na faixa de energia $0.70 \lesssim U < U_c$ [região sombreada na Fig. 5.1] que QSS's apresentando magnetização nula e temperatura cinética menor do que a temperatura associada a solução de equilíbrio foram observados nas simulações, como ilustraremos mais à frente na Sec. 5.6.

Todas as médias temporais da Fig. 5.1, bem como os demais resultados numéricos deste capítulo, referem-se a uma *única* realização do sistema (5.1), sem nenhum tipo de média sobre eventos distintos. Nos deteremos aqui na análise apenas da temperatura cinética $T(t)$. Notar, mais uma vez, que acompanhar $T(t)$ na região de longo alcance está intimamente relacionado a acompanhar $M(t)$, sobretudo quando $\alpha = 0$ e conseqüentemente $T(t) = E/N - [1 - M^2(t)]/2$, relação deduzida substituindo as Eqs. (5.5) e (5.7) na Hamiltoniana (5.1). Cumpre observar novamente que comparamos médias temporais calculadas com energia fixa [microcanônico] com resultados analíticos a temperatura fixa [canônico]. Entretanto, no equilíbrio, foi demonstrada a equivalência entre os ensembles para o sistema (5.1) na região $0 \leq \alpha < d$ na Ref. [39].

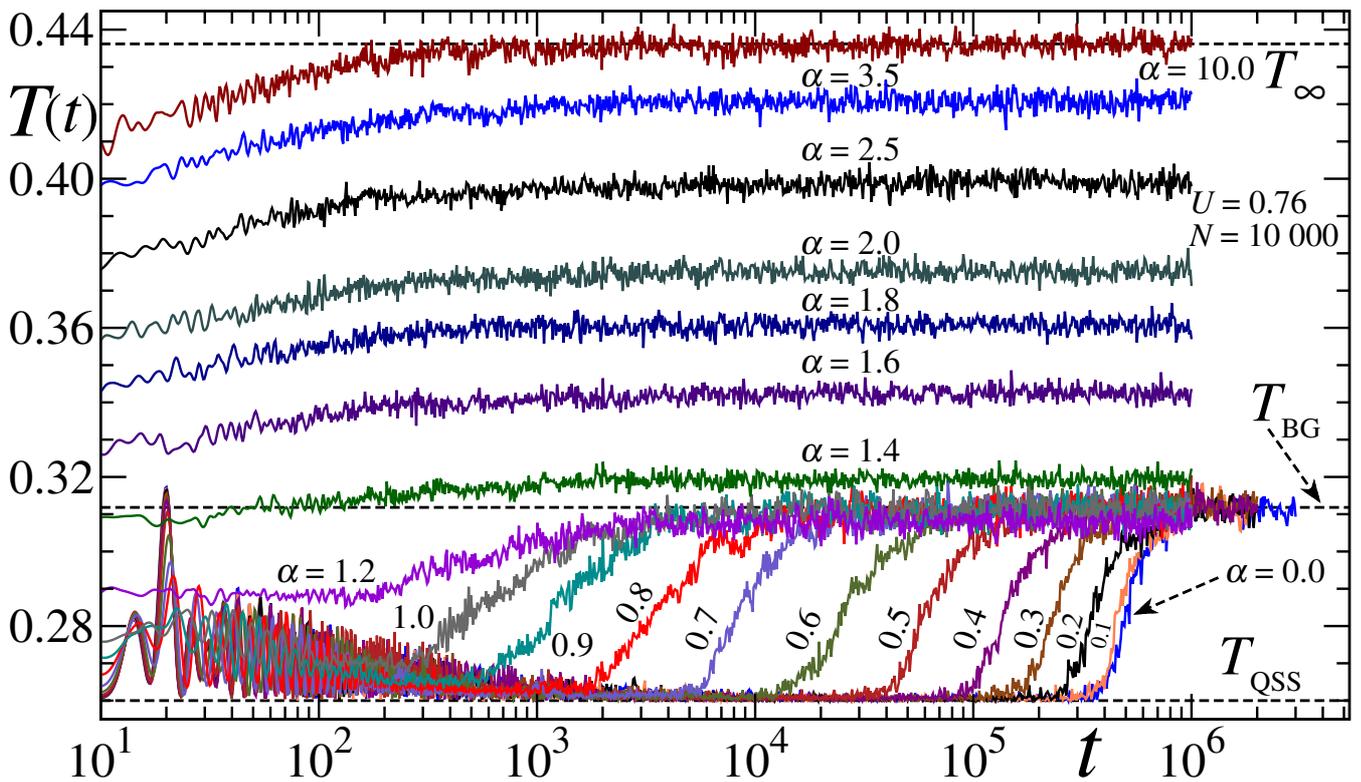


Fig. 5.2: Evolução da temperatura cinética $T(t) = K(t)/N$ [cf. Eq. (5.7)] para $E/N = U = 0.76$, $N = 10\,000$ e diversos valores de α no intervalo $\alpha \in [0.0, 10.0]$. Ao ser preparado com a condição inicial descrita na Sec. 5.3, o sistema rapidamente atinge o estado quase estacionário (QSS) e lá permanece por um longo período, que depende de α , N e U . Para que a média temporal de $T(t)$ [e a da magnetização $M(t)$] coincida com a temperatura analítica $T_{BG} \approx 0.312$ correspondente a essa energia [cf. Eqs. (5.3) e (5.4), linha tracejada do meio], devemos calculá-la após este período. Para $U = 0.76$, as simulações revelam um QSS com magnetização bem próxima de zero e temperatura coincidindo com o prolongamento com $M = M_{QSS} = 0$ da solução canônica: $T_{QSS} = U - 1/2 = 0.26$ [linha inferior]. QSS's com estas características são observados na faixa de energia $U \approx [0.70, U_c = 5/6]$ indicada de forma sombreada na Fig. 5.1 mais acima, na qual são exibidas também as médias temporais sobre as realizações com $\alpha = 0.0, 0.4, 0.8$ e 10.0 após o QSS. Para $\alpha \gtrsim 1$, o QSS praticamente não é mais detectado. Conforme α aumenta, $T(t)$ abandona a temperatura canônica T_{BG} , do modelo com $0 \leq \alpha < 1$, e aproxima-se da solução do modelo com $\alpha \rightarrow \infty$, alcançando $T_\infty \approx 0.436$ em torno de $\alpha \lesssim 10$ [linha tracejada superior]. Nesta região intermediária entre $1 \leq \alpha < \infty$, desconhecemos solução analítica. Os dados correspondem, para cada α , a uma única realização do sistema (5.1). A duração t_{QSS} destes QSS's em função de α é exibida na Fig. 5.3 a seguir.

5.5 Influência de α no QSS

A Fig. 5.2 exibe a evolução da temperatura cinética $T(t)$ para $(U, N) = (0.76, 10\,000)$ e diversos valores de α entre $\alpha \in [0.0, 10.0]$. Para $0 \leq \alpha < 1$, após o estado quase estacionário (QSS), os resultados numéricos acumulam-se no valor de T correspondente à solução neste intervalo, $T_{BG} \approx 0.312$ no caso [linha tracejada no meio]. Conforme o valor do parâmetro α aumenta, os resultados numéricos aproximam-se da solução associada ao modelo com $\alpha \rightarrow \infty$, alcançando $T_\infty \approx 0.436$ em torno de $\alpha \lesssim 10$ [linha tracejada superior], transitando suavemente entre as soluções correspondentes a $\alpha < 1$ e a $\alpha \rightarrow \infty$. Apesar de não exibida, a transição da magnetização de M_{BG} para $M = 0$ [valor correspondente a $\alpha \rightarrow \infty$] é mais abrupta, com $M \approx 0$ sendo alcançado em torno de $\alpha \approx 1.5$, resultado similar ao observado com os rotores XY [cf. Fig. 4.1, Pág. 28]. Nesta região intermediária

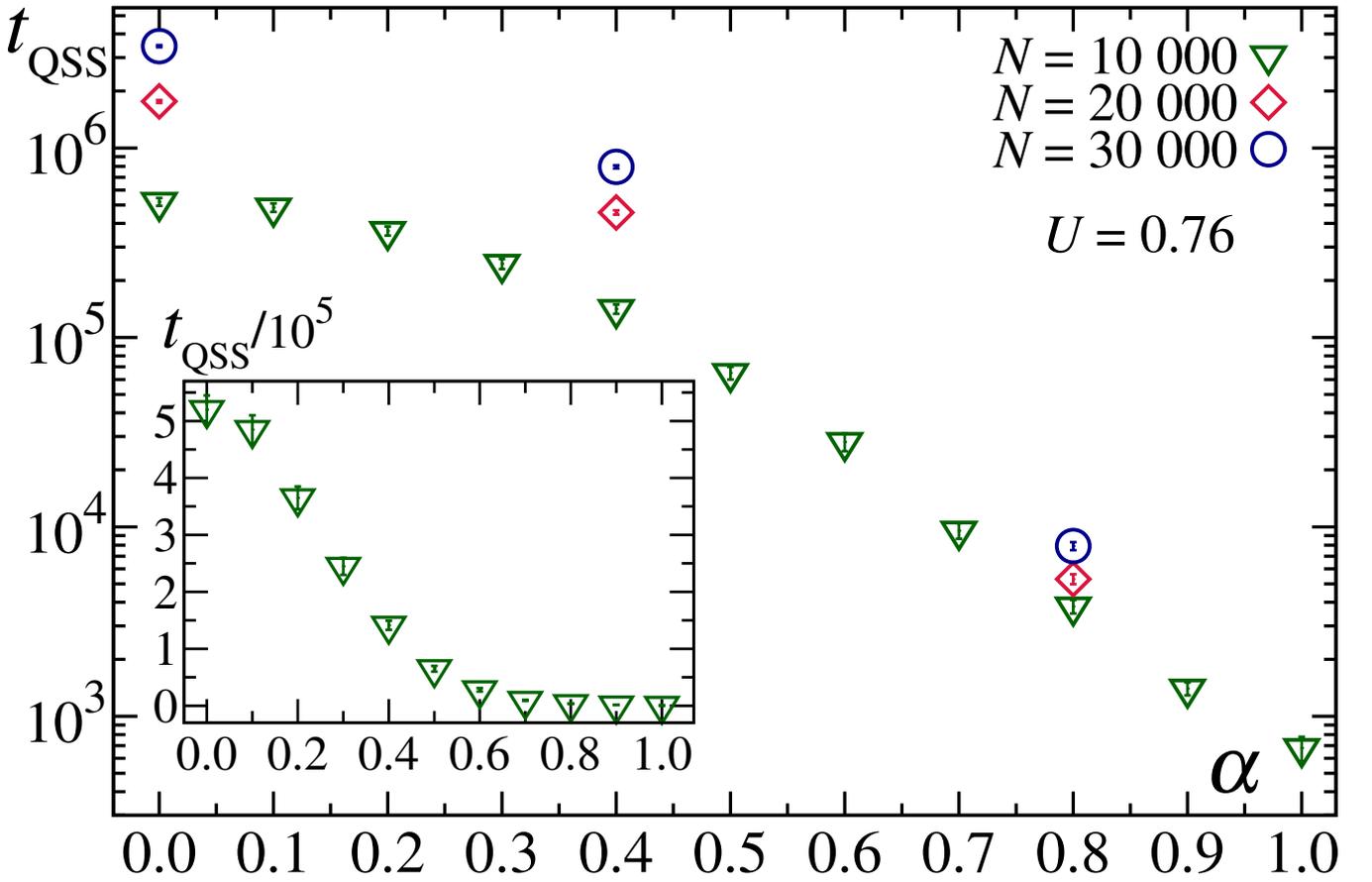


Fig. 5.3: Duração do QSS t_{QSS} em função de α para $U = 0.76$ e três valores de N , $N = 10\,000$, $20\,000$ e $30\,000$. Embora haja forte dependência do tamanho N , as simulações indicam que $t_{\text{QSS}} \rightarrow 0$ quando $\alpha \rightarrow 1$ nos três casos analisados. No *inset*, os mesmos dados para $N = 10\,000$ em eixos lineares. Os resultados associados a $N = 10\,000$ são provenientes dos QSS's exibidos na Fig. 5.2 acima. A evolução de $T(t)$ para os outros dois valores de N estão na Fig. 5.7.

entre $1 \leq \alpha < \infty$, para a qual não conhecemos solução analítica, $T(t)$ estabiliza abaixo de T_{BG} no intervalo $1.0 < \alpha \lesssim 1.3$ e depois então segue se aproximando de T_{∞} , comportamento também observado no capítulo anterior [ver Figs. 4.3 e 4.8]. Para $0 \leq \alpha < 1$, o QSS apresenta magnetização bem próxima de zero e temperatura cinética bem próxima do prolongamento da solução analítica $T_{\text{QSS}} = U - 1/2 = 0.26$ [linha tracejada inferior]. Para $\alpha \gtrsim 1$, não há evidência clara de QSS de duração apreciável. Quando $\alpha \gg 1$, nenhuma dependência de N é esperada, porque a interação é efetivamente de curto alcance. Entretanto, esses resultados numéricos não excluem um possível efeito de tamanho finito na região logo acima de $\alpha = 1$.

Os resultados da Fig. 5.2 foram obtidos com $U = 0.76$, energia localizada aproximadamente na metade do intervalo $0.70 \lesssim U < U_c = 0.833\dots$ em que QSS's de características comuns são observados [região sombreada na Fig. 5.1]. Como detalhado na Sec. 5.6 a seguir, para N fixo, a duração do QSS cresce exponencialmente à medida que nos aproximamos da energia crítica U_c , e a diferença entre T_{QSS} e T_{BG} é maior quanto mais próximo de $U = 0.70$. Escolhemos então analisar $U = 0.76$ com o propósito de exibir QSS's de duração apreciável, mas não muito longos por motivos computacionais, e de temperatura cinética distante o suficiente de T_{BG} para que fossem claramente identificados. Contudo, esses resultados devem se estender a toda região $U \approx [0.70, U_c]$ na qual QSS's de magnetização nula foram detectados.

Na região $0 \leq \alpha \leq 1$, a duração do QSS diminui conforme α aumenta. Para quantificar esse intervalo, introduzimos o tempo de vida do QSS, denotado por t_{QSS} , definido como o tempo transcorrido de $t=0$ até a temperatura cinética $T(t)$ atingir o valor médio entre a temperatura no QSS T_{QSS} e a temperatura de equilíbrio T_{BG} . Para α próximo de $\alpha=1$, $T(t)$ estabiliza um pouco acima do prolongamento de magnetização nula, quer dizer, $T(t) \gtrsim T_{\text{QSS}} = U - 1/2$, principalmente quando $\alpha \geq 0.80$, como mostra a Fig. 5.2. Essa pequena diferença foi considerada no cálculo de t_{QSS} . Computar t_{QSS} a partir de $t=0$ inclui um curto transiente antes de $T(t)$ estabilizar em T_{QSS} ou próximo dele. No entanto, a influência desse transiente no resultado final de t_{QSS} é desprezível para N suficientemente grande. Esse mesmo expediente aplicado aqui para determinar a duração do QSS em função de α , é repetido adiante em função de U e em função de N .

O comportamento do tempo de vida t_{QSS} em função do parâmetro α é exibido na Fig. 5.3. Nela estão representados dados obtidos com energia $U = 0.76$, três valores de N , $N = 10\,000$, $20\,000$ e $30\,000$, com α variando no intervalo $0 \leq \alpha \leq 1$. A evolução de $T(t)$ que produziu os resultados correspondentes a $N = 10\,000$ está na Fig. 5.2, a evolução para os demais valores de N pode ser vista na Fig. 5.7 mais à frente. Na representação log-linear notamos que t_{QSS} é fortemente dependente do tamanho N , porém as simulações para os três valores de N analisados indicam que $t_{\text{QSS}} \rightarrow 0$ quando $\alpha \rightarrow 1$. Esta tendência é mais claramente percebida no *inset*, em que os dados associados a $N = 10\,000$ são apresentados em eixos lineares.

5.6 Influência de U no QSS

Os estados quase estacionários (QSS's) da Fig. 5.2 surgem quando $0.70 \lesssim U < U_c$, como mostra a Fig. 5.4, na qual é exibida a evolução temporal de $T(t)$ para valores típicos de U neste intervalo considerando três valores típicos de α na região de longo alcance, $\alpha = 0.0, 0.4$ e 0.8 . As simulações foram realizadas com $N = 10\,000$ e os dados convenientemente reescalados pela respectiva temperatura de equilíbrio T_{BG} .

Para todas as energias investigadas compreendidas em $U \in [0.70, 0.83]$, foi verificada a existência de QSS's com magnetização nula [ou muito próxima de zero] e temperatura cinética muito próxima do prolongamento com $M = 0$ da solução analítica $T(t) \gtrsim T_{\text{QSS}} = U - 1/2$. Após um período suficientemente longo, ocorre a transição para o estado em que a temperatura e a magnetização coincidem com as predições da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs. Embora não exibido, mesmo para energias logo acima de $U_c = 5/6 \approx 0.833$ [e.g., $U = 0.84$], o QSS não é mais observado, com $T(t)$ e $M(t)$ atingindo os valores canônicos T_{BG} e M_{BG} após breve transiente. Para determinado valor de α , as menores energias produzem QSS's de menor duração, com o tempo de vida t_{QSS} aumentando significativamente conforme nos aproximamos da energia crítica U_c . Por outro lado, durante o QSS, a diferença entre a temperatura cinética $T(t)$ e a de equilíbrio T_{BG} é maior para as menores energias, indo a zero com $U \rightarrow U_c$. Em outras palavras, apesar de t_{QSS} crescer com a aproximação de U_c , o QSS desaparece no limite $U \rightarrow U_c$ pois a diferença entre essas duas quantidades, $T(t)$ e T_{BG} , vai a zero, e, consistentemente, não é mais detectado quando $U > U_c$. Ademais, para determinada energia, como discutido em detalhes para $U = 0.76$ na seção anterior, quanto maior o parâmetro α , menor o tempo de vida t_{QSS} [cf. Figs. 5.2 e 5.3], de modo que os experimentos numéricos indicam o desaparecimento do QSS em ambos os limites $\alpha \rightarrow 1$ e $U \rightarrow U_c$.

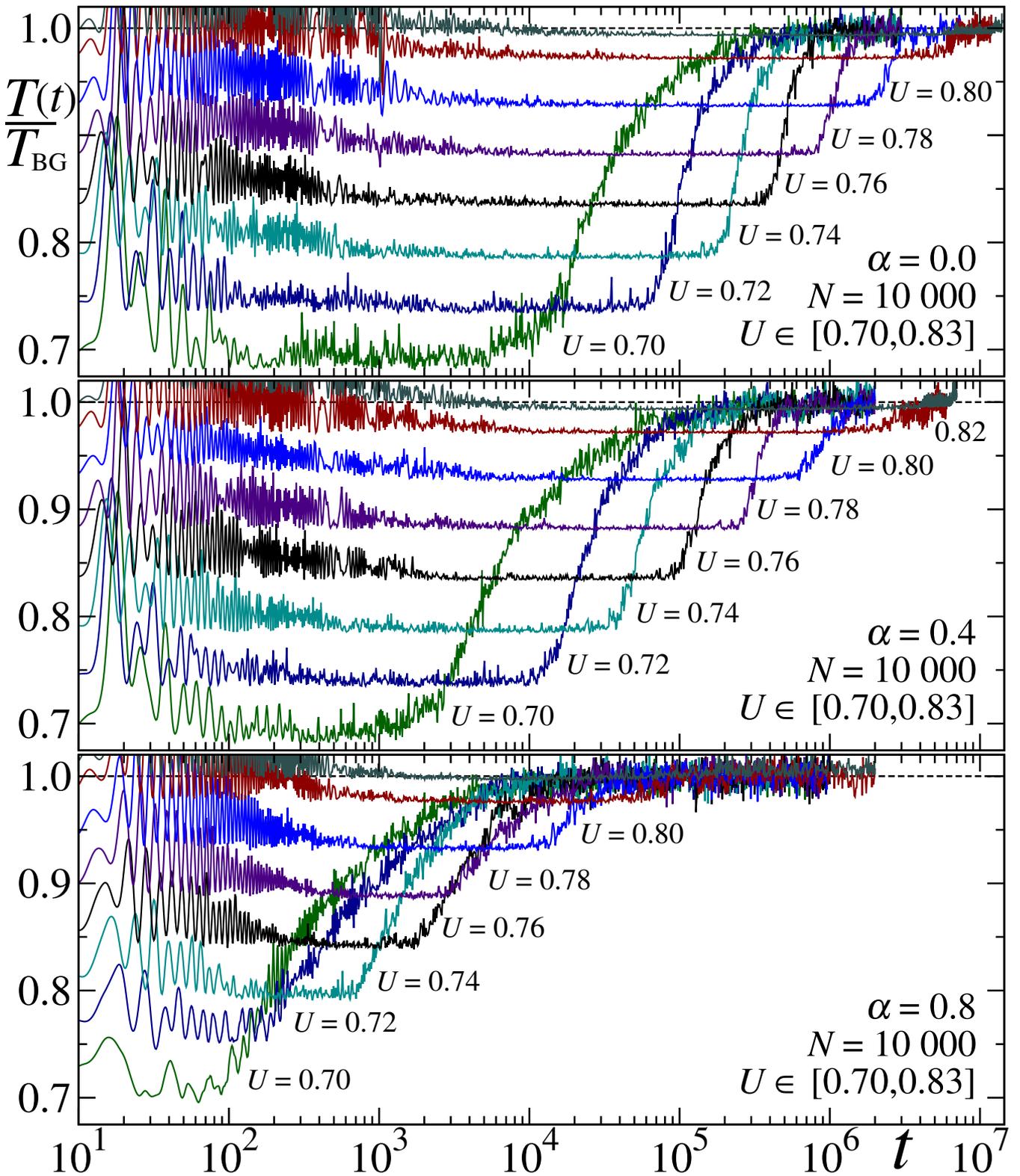


Fig. 5.4: Evolução da temperatura cinética para $N = 10\,000$, três valores típicos de α na região de longo alcance [$\alpha = 0.0, 0.4$ e 0.8] e energia variando no intervalo $0.70 \leq U < U_c \approx 0.833$ [este intervalo corresponde à região sombreada na Fig. 5.1]. Os dados foram reescalados pela respectiva temperatura de equilíbrio T_{BG} , de modo que $T(t)/T_{BG} \approx 1$ após o QSS. A duração do QSS cresce exponencialmente conforme a energia se aproxima de U_c , mas esse crescimento é acompanhado pela diminuição da diferença entre $T(t)$ no QSS e T_{BG} . Os dados correspondentes a $U = 0.76$ são os mesmos da Fig. 5.2 mais acima, e o tempo de vida t_{QSS} destes QSS's em função de U é exibido na Fig. 5.5 a seguir.

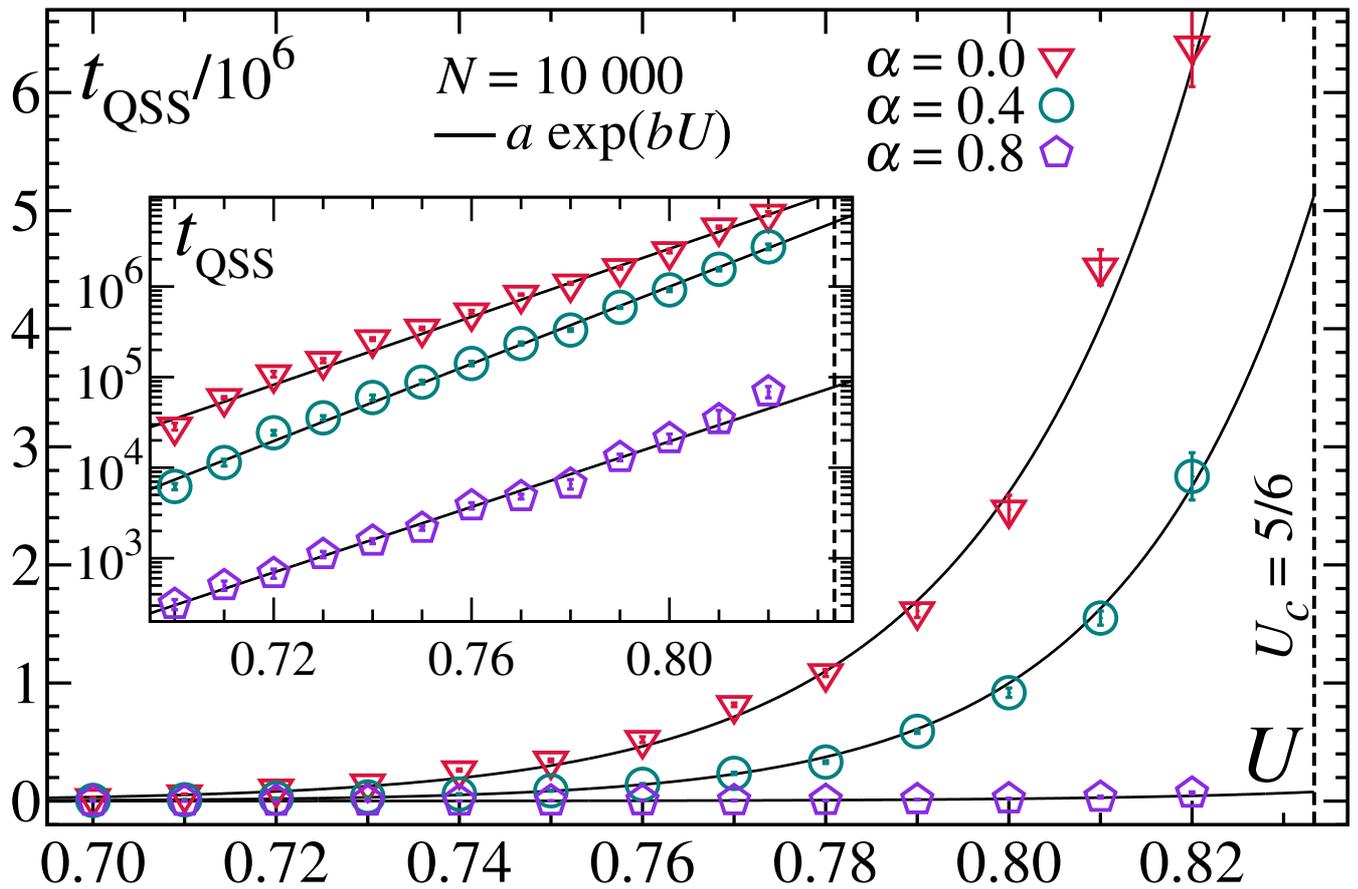


Fig. 5.5: Duração do QSS t_{QSS} em função da energia U para $N = 10\,000$ e três valores de α dentro da região de longo alcance, $\alpha = 0.0, 0.4$ e 0.8 . Para os três valores de α analisados, as simulações indicam um crescimento exponencial de t_{QSS} no intervalo $0.70 \leq U < U_c$: $t_{\text{QSS}} = ae^{bU}$ [a e b são parâmetros de ajuste]. No *inset*, os mesmos dados com a ordenada em escala logarítmica. Acima de $U = U_c$ [linha tracejada], o QSS não é mais observado para nenhum valor de α . Alguns destes resultados são provenientes dos QSS's exibidos na Fig. 5.4 acima.

O comportamento do tempo de vida t_{QSS} em função da energia U é apresentado na Fig. 5.5. Para os três valores de $\alpha < 1$ analisados, as simulações indicam que t_{QSS} cresce exponencialmente com U no intervalo $U \in [0.70, 0.82]$, $t_{\text{QSS}} = ae^{bU}$ [a e b são parâmetros de ajuste], como mostra mais claramente a representação log-linear no *inset*, onde os dados são bem descritos por uma reta. Ainda que o tempo t_{QSS} cresça muito quando $U \rightarrow U_c$, esse crescimento é acompanhado pela diminuição da diferença entre $T(t) \approx T_{\text{QSS}}$ no QSS e o valor canônico T_{BG} . Por esse motivo, os resultados correspondentes a $U = 0.83 \approx U_c$ não estão presentes na Fig. 5.5. É difícil estimar t_{QSS} para esta energia, as duas temperaturas estão muito próximas, como visto na Fig. 5.4.

Os QSS's exibidos na Fig. 5.4 são caracterizados por magnetização nula e temperatura cinética seguindo o prolongamento de magnetização nula da solução analítica na região de longo alcance. Este comportamento é observado na faixa de energia $0.70 \lesssim U < U_c$ e valores de α entre $0 \leq \alpha \lesssim 1$. Para energias abaixo de $U = 0.70$, o estado estacionário continua existindo, contudo a temperatura cinética abandona o prolongamento $T_{\text{QSS}} = U - 1/2$, a magnetização deixa de ser zero — apesar da condição inicial com $M \approx 0$ — e a diferença entre resultados numéricos e analíticos diminui à medida que a energia se aproxima de $U = 0.50$. Essa descrição é ilustrada na Fig. 5.6. Nela, os resultados numéricos correspondem a médias temporais de $T(t)$ calculadas durante o QSS para $N = 10\,000$, três valores de $\alpha < 1$ e energia entre $U \in [0.51, 0.83]$. As curvas analíticas são as mesmas do grá-

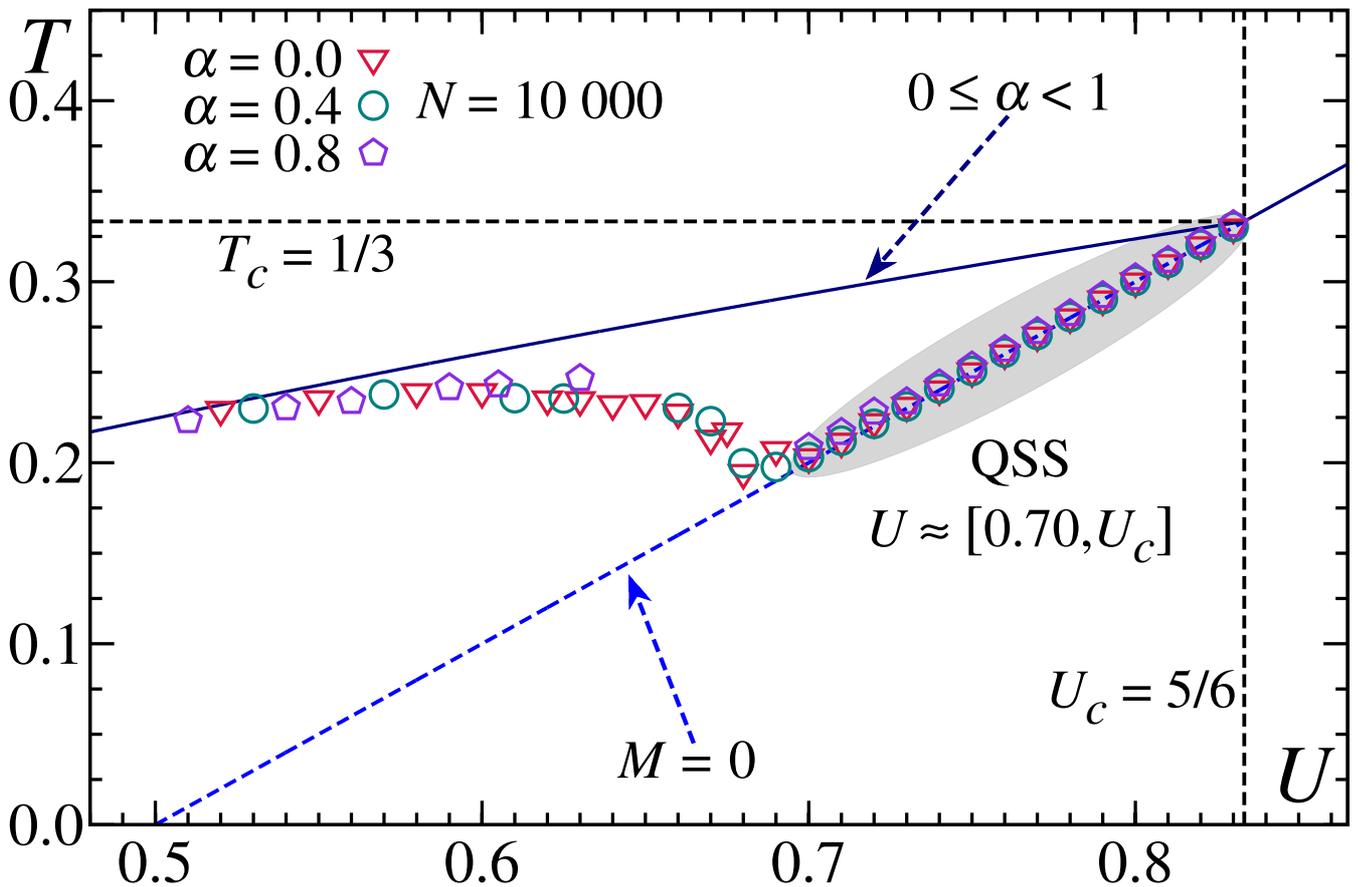


Fig. 5.6: Parte do gráfico T vs. U exibido na Fig. 5.1 destacando o intervalo de energia no qual estados quase estacionários foram detectados [a curva associada a $\alpha \rightarrow \infty$ foi omitida]. Resultados numéricos correspondem a médias temporais de $T(t)$ calculadas durante o QSS, para $N = 10\,000$ e três valores de $\alpha < 1$. Quando $0.70 \lesssim U < U_c$, o QSS apresenta magnetização nula e temperatura cinética acompanhando o prolongamento com $M=0$ da solução analítica $T_{\text{QSS}} = U - 1/2$ [região sombreada sobre a linha tracejada; a evolução de $T(t)$ que produziu estes resultados está na Fig. 5.4]. Para energias abaixo de $U = 0.70$, o QSS deixa de apresentar magnetização nula e $T(t)$ abandona o prolongamento da solução analítica, aproximando-se do resultado canônico conforme U se aproxima de $U = 0.50$ [lembramos que a condição inicial adotada proíbe simulações com $U < 0.50$]. Neste intervalo $0.50 < U < 0.70$, a temperatura cinética diminui com o aumento da energia, característica de calor específico [microcanônico] negativo.

fico T vs. U exibido na Fig. 5.1 com destaque para o intervalo de energia de interesse. Para $U < 0.70$ e este valor de $N = 10\,000$ utilizado, os QSS's são mais claramente observados quando $\alpha = 0.0$, sendo algumas vezes de difícil identificação quando $\alpha = 0.80$. De modo geral, os estados quase estacionários na região $U < 0.70$ são menos robustos do que aqueles associados a $0.70 \lesssim U < U_c$ exibidos nas Figs. 5.2 e 5.4 acima [robusto no sentido de reprodutibilidade, de duração, de atingir uma temperatura bem definida, de ser observado para valores pequenos de N]. Deve ser notado que, neste intervalo $0.50 < U < 0.70$, a temperatura cinética durante o QSS decresce conforme a energia aumenta, característica de calor específico negativo, um fenômeno estritamente microcanônico. Tal comportamento também é observado com o modelo HMF [e.g., Fig. 1 de [75]]; para uma abordagem analítica, ver [66, 86]], de modo que o presente resultado indica que esta pode ser uma propriedade genérica de sistemas de spins clássicos com interação de longo alcance, uma propriedade independente da dimensionalidade n do vetor \mathbf{S}_i . Outra propriedade compartilhada por esses dois modelos diz respeito ao crescimento do tempo de vida do QSS com o tamanho N , tema da próxima seção.

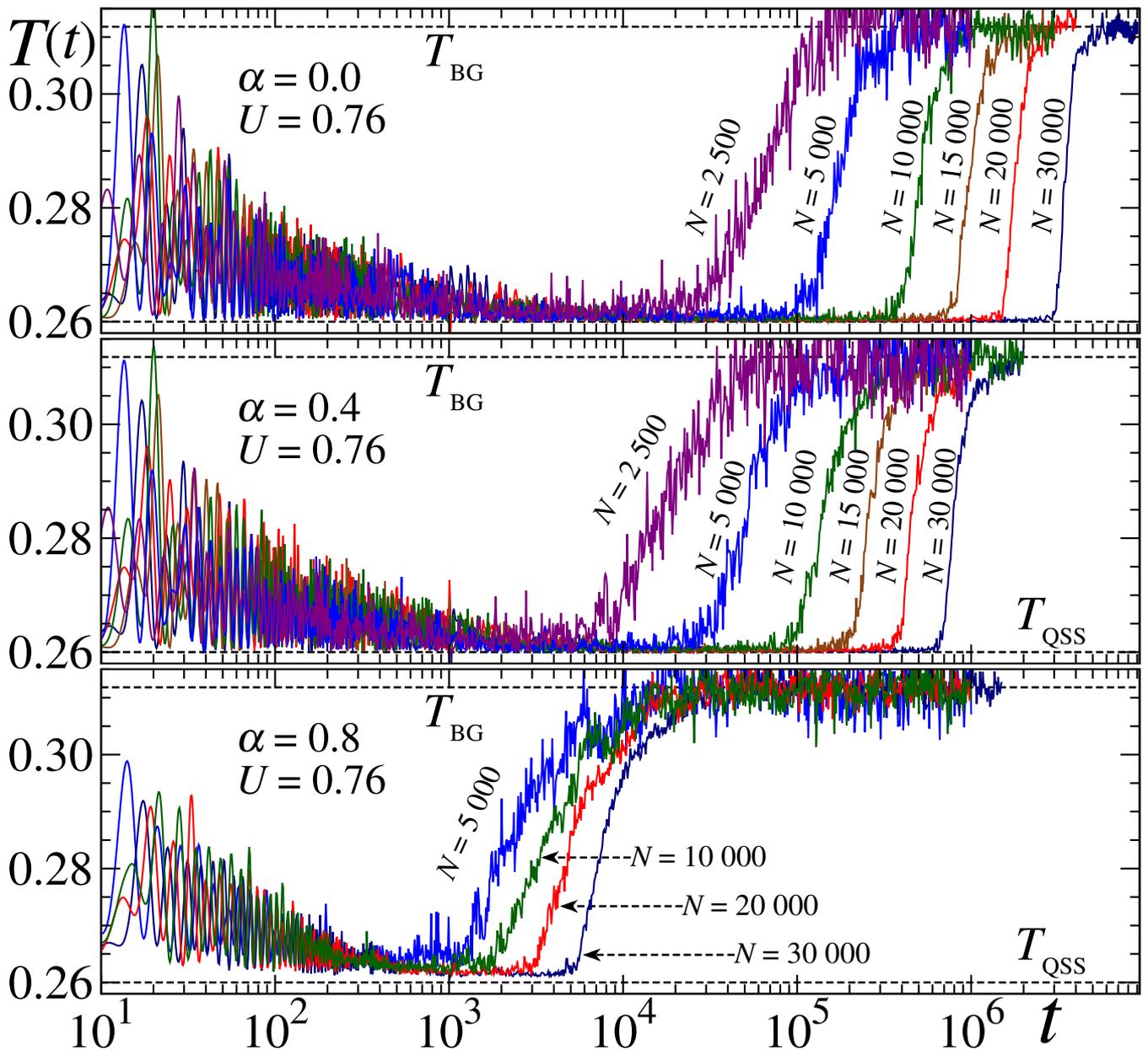


Fig. 5.7: Evolução de $T(t)$ para $U = 0.76$, tamanho variando a partir de $N = 2500$ até $N = 30000$ para os dois menores valores de α [$\alpha = 0.0$ e 0.4], e a partir de $N = 5000$ para o maior [$\alpha = 0.8$]. A duração do QSS tem grande dependência do tamanho do sistema N . Essa dependência é maior quanto maior o alcance da interação, quanto menor o valor de α . Os resultados correspondentes a $N = 10000$ são os mesmos das Figs. 5.2 e 5.4 mais acima. A duração t_{QSS} destes QSS's em função de N é exibida na Fig. 5.8 a seguir.

5.7 Influência de N no QSS

O que talvez seja a característica mais interessante do estado quase estacionário, e de profundas implicações, é o crescimento de seu tempo de vida t_{QSS} conforme o tamanho do sistema N aumenta. Este comportamento é revelado de modo bastante claro na Fig. 5.7, na qual é apresentada a evolução da temperatura cinética para energia $U = 0.76$, os três valores de $\alpha < 1$ analisados acima e número de rotores variando de $N = 2500$ até $N = 30000$. Escolhemos novamente $U = 0.76$ [energia aproximadamente na metade da região sombreada na Fig. 5.6] pela razão discutida na Sec. 5.5, quando o QSS em função de α foi analisado, mas esses resultados devem se estender a todo intervalo $0.70 \lesssim U < U_c$ em que QSS's de magnetização nula são observados. Como o tempo de vida t_{QSS}

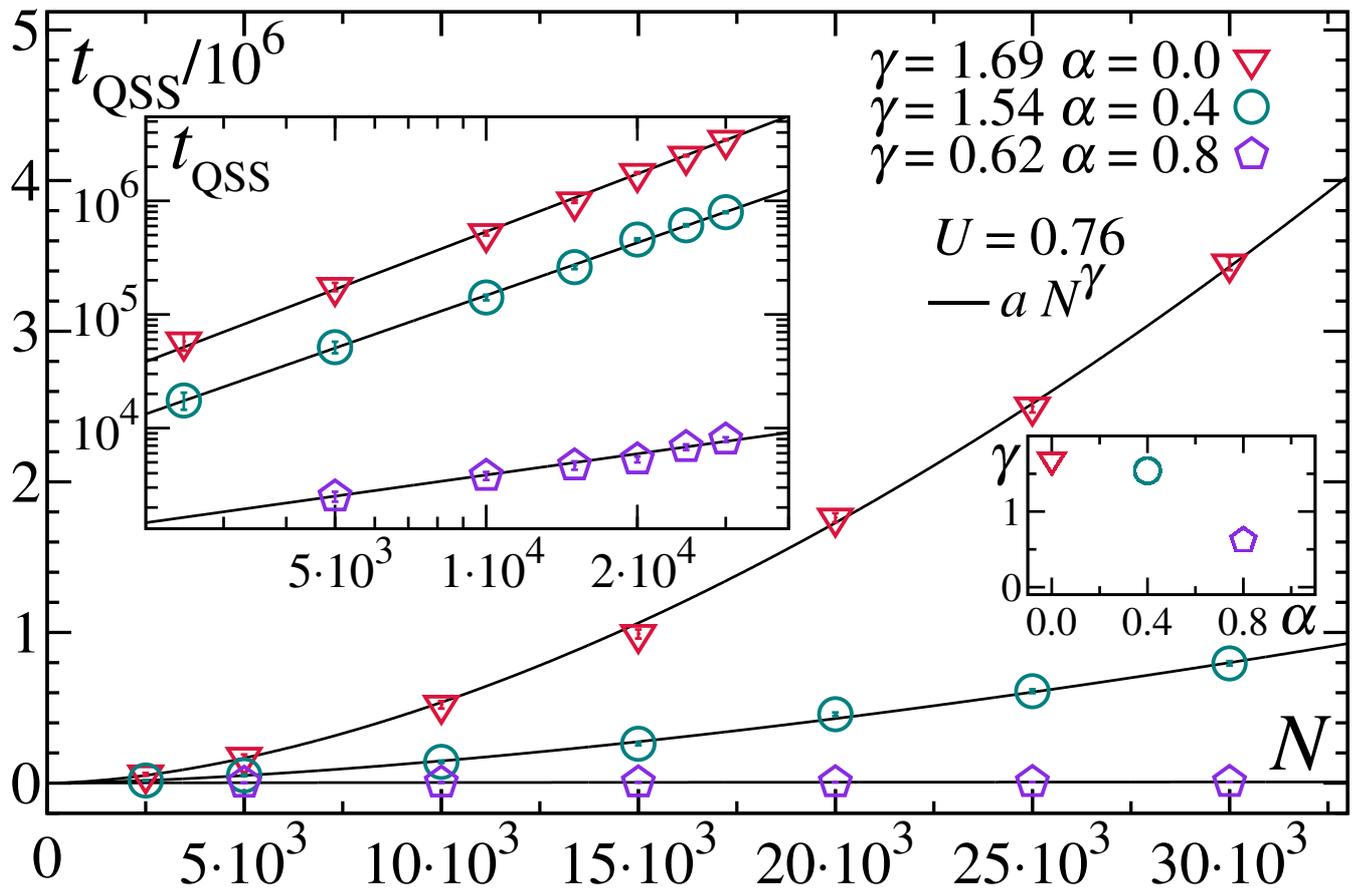


Fig. 5.8: Crescimento do tempo de vida t_{QSS} em função do número de rotores N para energia $U=0.76$ e três valores de $\alpha < 1$. Para os três valores de α analisados, as simulações indicam um crescimento em lei de potência de t_{QSS} com o tamanho N : $t_{\text{QSS}} = aN^\gamma$ [a é parâmetro de ajuste]. No *inset* maior, temos os mesmos dados em escala log-log; no menor, os valores de γ obtidos do ajuste contra α . A maioria destes resultados são provenientes dos QSS's exibidos na Fig. 5.7 acima.

decrece e as flutuações em $T(t)$ tendem a aumentar conforme N diminui, a fim de identificar adequadamente o QSS com uma única realização numérica, o tamanho N deve ser suficientemente grande [e.g., $N \geq 2500$]. Para o maior valor α [i.e., $\alpha=0.80$], o tempo t_{QSS} é significativamente menor. Neste caso, foi necessário que o menor sistema simulado tivesse tamanho N maior que os demais [e.g., $N \geq 5000$].

O crescimento de t_{QSS} com N é uma propriedade conhecida do modelo α -XY na região de longo alcance $0 \leq \alpha < 1$ e havia sido identificado nos trabalhos prévios com os rotores de Heisenberg para o caso particular $\alpha=0$ [38, 156, 157]. Esse comportamento encerra consequências físicas relevantes, algumas ligadas à aplicabilidade da mecânica estatística tradicional. Realmente, os resultados numéricos da Fig. 5.7 indicam que a ordem entre o limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$ e o temporal $t \rightarrow \infty$ tem efeito importante na definição do estado do sistema, e considerando-se o limite $N \rightarrow \infty$ primeiro, o sistema possivelmente permanecerá no QSS indefinidamente. Neste cenário, médias temporais das grandezas dinâmicas $T(t)$ e $M(t)$ não coincidem com as previsões analíticas, o que pode ser interpretado como quebra de ergodicidade — uma das premissas básicas da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs —, abrindo espaço também para uma reavaliação dos resultados que apontam a equivalência entre os ensembles. O QSS representaria então o estado final do modelo, e não uma fase transiente de não equilíbrio. Se esse estado deve ser interpretado como um verdadeiro estado

de equilíbrio termodinâmico, é uma questão importante que necessita ser verificada com cuidado. Reforçando os comentários da Sec. 4.4, lidamos com evidências numéricas, e não se deve afirmar que, no limite $N \rightarrow \infty$, o sistema permanecerá de fato no QSS eternamente, jamais transitando para o estado caracterizado pelos valores T_{BG} e M_{BG} preditos pela termoestatística de Boltzmann-Gibbs.

O comportamento do tempo de vida t_{QSS} em função do tamanho N é apresentado na Fig. 5.8. Para os três valores de α analisados, o crescimento de t_{QSS} foi ajustado por uma lei de potência da forma $t_{\text{QSS}} \propto N^\gamma$, com o expoente $\gamma = \gamma(\alpha)$ decrescendo conforme α aumenta de $\gamma \approx 1.69$ quando $\alpha = 0.0$ até $\gamma \approx 0.62$ quando $\alpha = 0.8$. O *inset* maior exibe os mesmos dados na representação log-log e o comportamento em lei de potência é mais claramente percebido. Para $\alpha = 0.0$, o valor estimado de $\gamma \approx 1.68$ concorda com o da Ref. [157], em que $\gamma \approx 1.7$ foi obtido. Esse valor de γ também foi observado numericamente nos QSS's do modelo HMF [modelo α -XY com $\alpha = 0$] provenientes de condições iniciais com magnetização nula como as usadas aqui [82, 83], resultado corroborado por abordagem analítica na Ref. [87]. O valor comum de $\gamma(0) \approx 1.7$ entre os dois modelos indica que a relação $t_{\text{QSS}} \propto N^{\gamma(0)}$ pode ser uma propriedade universal de spins clássicos com interação de longo alcance, não afetada pela dimensão n do vetor \mathbf{S}_i . No *inset* menor da Fig. 5.8 é apresentado o expoente $\gamma(\alpha)$ para os três valores de α analisados. Apesar da dificuldade em computar t_{QSS} à medida que α se aproxima de $\alpha = 1$, as simulações sugerem que $\gamma \rightarrow 0$ no limite $\alpha \rightarrow 1$. Contudo, com poucos pontos, não é seguro propor uma forma funcional para $\gamma(\alpha)$ que descreva como γ decresce com α [para os rotores XY, foi observado [165] um comportamento aproximadamente constante de $\gamma(\alpha)$ até $\alpha \approx d/2 = 0.5$, e um decréscimo linear a partir deste valor]. Cumpre observar que a influência do tamanho N sobre o tempo de vida t_{QSS} é menos acentuada na região $U < 0.70$, na qual os QSS's exibem magnetização diferente de zero.

5.8 Sumário e Perspectivas

Este capítulo foi dedicado à análise numérica de um sistema Hamiltoniano unidimensional de N rotores localizados de Heisenberg com interação de alcance controlável. A função Hamiltoniana do sistema é definida pela Eq. (5.1) e as simulações foram realizadas com as técnicas da Dinâmica Molecular no ensemble microcanônico [energia e N fixos]. De modo telegráfico, os principais resultados e conclusões decorrentes desta análise foram:

- ▶ Pela primeira vez foi numericamente verificado o correto escalamento da interação para sistemas clássicos de spins \mathbf{S}_i 's de dimensionalidade $n > 2$ [escalamento de Tsallis, Eq. (5.2)]. O escalamento não apenas recupera a extensividade, mas também, como previsto analiticamente na Ref. [39], confere ao modelo comportamento termodinâmico universal na região de longo alcance $0 \leq \alpha/d < 1$, como mostra a Fig. 5.1.
- ▶ Em ampla faixa de energia abaixo da crítica e em toda região de longo alcance, foi verificada a existência de estados quase estacionários (QSS's) — estados caracterizados por valores de temperatura e magnetização distintos daqueles previstos pela termoestatística tradicional.

- ▶ O tempo de vida t_{QSS} do QSS sofre forte influência do parâmetro α , da energia U e do número de rotores N . Nos intervalos $0.70 \lesssim U < U_c$ e $0 \leq \alpha \lesssim 1$, o seguinte comportamento de t_{QSS} em função de α , U e N foi observado:
 - ▷ Não obstante a forte dependência de N , os resultados indicam que $t_{\text{QSS}} \rightarrow 0$ quando $\alpha \rightarrow 1$ para todos os valores de N analisados [Figs. 5.2 e 5.3].
 - ▷ Crescimento exponencial com U , $t_{\text{QSS}} \propto e^{bU}$, porém $t_{\text{QSS}} \rightarrow 0$ quando $U \rightarrow U_c$, pois, para energias acima de U_c , o QSS desaparece [Figs. 5.4 e 5.5].
 - ▷ $t_{\text{QSS}} \propto N^\gamma$, com o expoente $\gamma(\alpha)$ positivo mas $\gamma \rightarrow 0$ quando $\alpha \rightarrow 1$ [Fig. 5.8]. Particularmente para $\alpha = 0$, foi observado $\gamma(0) \approx 1.7$, valor que concorda com o da Ref. [157] e também com o do modelo HMF, indicando que este comportamento não depende da dimensão n do vetor \mathbf{S}_i . Mais importante, este comportamento sugere que os limites temporal $t \rightarrow \infty$ e termodinâmica $N \rightarrow \infty$ não comutam quando a interação é de longo alcance.
 - ▷ Quando $U < 0.70$, o QSS tem propriedades distintas. Nesta região, a temperatura T_{QSS} diminui com a energia U , característica de calor específico negativo [Fig. 5.6].

Modificando o modelo original [38], introduzindo o decaimento da interação em lei de potência da forma $1/r^\alpha$, a dimensão espacial d da rede ganha importância, abrindo novas possibilidades de investigação. A seguir, três questões relevantes que serão oportunamente exploradas:

- ▶ Influência da dimensão d no estado quase estacionário.
- ▶ Influência da razão α/d no comportamento do expoente de Lyapunov λ_{max} . Teria a razão α/d , e não α e d de modo independente, papel importante no comportamento de λ_{max} [como ocorre no modelo α -XY, cf. Sec. 4.10, Pág. 54] ?
- ▶ Influência do parâmetro α na distribuição de velocidades do sistema. Seriam as distribuições de velocidades no regime de longo alcance melhor descritas por q -gaussianas ?

Capítulo 6

Aplicações Recentes de Entropias Não Aditivas

Neste capítulo trataremos com mais detalhes da entropia S_δ mencionada no Cap. 1 e de sua unificação com a entropia S_q , definindo a entropia de dois parâmetros $S_{q,\delta}$. Analisaremos a relação entre S_δ e a entropia de Bekenstein & Hawking de buracos negros além de resultados recentes de altas energias relacionados a S_q . As discussões deste capítulo podem ser acessadas nas Refs. [1, 2, 6–8].

6.1 Classe de Correlação e Entropia

Retomando a discussão do Cap. 1, a ponte entre as variáveis termodinâmicas macroscópicas e o mundo microscópico governado pelas leis físicas fundamentais é a entropia. Na mecânica estatística, entropia é um funcional de probabilidades, enquanto na termodinâmica, como originalmente imaginada por Clausius, é a função de estado demandada pela Segunda Lei. Após o trabalho de Shannon sobre teoria da comunicação, entropia deixou de ser um conceito exclusivo da termodinâmica e o funcional entrópico ganhou importância para além das ciências naturais. No entanto, quando o interesse é a conexão entre os mundos micro e macro, a exigência de extensividade restringe o funcional permitido para representar a entropia física do sistema. Extensividade é uma propriedade diferente de aditividade. Aditividade depende da forma matemática do funcional entrópico, e nada mais. Extensividade depende também do modo como os constituintes microscópicos do sistema se associam. Como consequência, verificar se um funcional é aditivo é simples, mas, muitas vezes, é extremamente difícil determinar se esse funcional aplicado a um sistema específico resulta em uma entropia termodinâmica extensiva.

É imediato verificar a extensividade da entropia de Boltzmann-Gibbs quando o sistema físico pertence à *classe exponencial*, definido como aquele cujo número de microestados escala com o tamanho N do sistema como $W(N) \sim \mu^N$ [$\mu > 1$] no limite $N \rightarrow \infty$. Seguindo Penrose [166, Cap. 5], é um trabalho algébrico simples verificar que o funcional S_{BG} é aditivo. De fato, sendo A e B dois sistemas probabilísticos independentes [portanto $p_{ij}^{A+B} = p_i^A p_j^B$ para qualquer par i, j , e consequentemente $W^{A+B} = W^A W^B$], vem:

$$S_{\text{BG}}(A+B) = -k_{\text{B}} \sum_{i=1}^{W^A} \sum_{j=1}^{W^B} p_{ij}^{A+B} \ln p_{ij}^{A+B} = S_{\text{BG}}(A) + S_{\text{BG}}(B) \quad (6.1)$$

Sistemas da classe exponencial de modo geral exibem fraca correlação entre seus constituintes, e sistemas independentes [*e.g.*, gás ideal clássico] são casos particulares desta classe.

Assumir que qualquer sistema físico seja da classe exponencial é uma premissa bastante restritiva.

Podemos ter, por exemplo, sistemas correlacionados da *classe lei de potência*, aqueles de microestados crescendo como $W(N) \sim N^\rho$ ($\rho > 0$) [ver cadeia quântica da Sec. 4.14.1]. Neste caso, a entropia aditiva S_{BG} é proporcional a $\ln N$, não é, portanto, extensiva. Notar que $N^\rho \ll \mu^N$ para N grande, que é um resultado intuitivo, uma vez que correlações tendem a limitar os estados acessíveis. Para esta classe, a fim de assegurar uma entropia linear com N , devemos trocar o funcional S_{BG} pela sua generalização não aditiva S_q :

$$S_q = k_{\text{B}} \sum_{i=1}^W p_i \ln_q \frac{1}{p_i} = -k_{\text{B}} \sum_{i=1}^W p_i^q \ln_q p_i = -k_{\text{B}} \sum_{i=1}^W p_i \ln_{2-q} p_i \quad (6.2)$$

As igualdades mais à direita seguem da manipulação do q -logaritmo $\ln_q x = [x^{1-q} - 1]/[1 - q]$, e no limite $q \rightarrow 1$, $S_1 = S_{\text{BG}}$ é recuperado[¶]. Escolhendo apropriadamente o índice q , a entropia S_q é extensiva para a classe lei de potência. Com efeito, otimizando o funcional (6.2) submetido ao vínculo de normalização da probabilidade $\sum p_i = 1$, encontramos que o extremo de S_q , assim como o de S_{BG} , também ocorre na situação equiprovável $p_i = 1/W \forall i$, de modo que $S_q = k_{\text{B}} \ln_q W$ neste caso. É imediato verificar então que, para $W(N) \sim N^\rho$, $S_q \propto N$ quando $q = 1 - 1/\rho$, resultado não alcançável com S_{BG} [alcançado se $\rho \rightarrow \infty$, e a lei de potência N^ρ se aproxima da exponencial μ^N]. O extremo $k_{\text{B}} \ln_q W$ representa um máximo global [um mínimo global] da entropia S_q caso $q > 0$ [caso $q < 0$] pois a Eq. (6.2) é um funcional estritamente côncavo [estritamente convexo] do jogo de probabilidade $\{p_i\}$. A Eq. (6.1) expressa a aditividade de S_{BG} . Considerando dois sistemas probabilísticos independentes, é novamente um trabalho algébrico simples obter:

$$S_q(A+B) = k_{\text{B}} \sum_{i=1}^{W^A} \sum_{j=1}^{W^B} p_{ij}^{A+B} \ln_q \frac{1}{p_{ij}^{A+B}} = S_q(A) + S_q(B) + \frac{1-q}{k_{\text{B}}} S_q(A) S_q(B) \quad (6.3)$$

que expressa a não aditividade de S_q . O resultado (6.3) acima inspirou o surgimento da chamada q -álgebra [167], que contém a q -soma \oplus_q , definida por $x \oplus_q y = x + y + (1-q)xy$, e o q -produto \otimes_q , definido tal que $\ln_q[x \otimes_q y] = \ln_q x + \ln_q y$, como exemplos de operações. Empregando o q -produto, e sendo os sistemas A e B correlacionados de modo que $W^{A+B} = W^A \otimes_q W^B$, é possível escrever a Eq. (6.3) na situação equiprovável como $S_q = S_q(W^A) + S_q(W^B)$, resultado que emula a propriedade (6.1) que expressa a aditividade de S_{BG} [ver Cap. 3 de [10]].

Voltemos a atenção à *classe exponencial esticada*, que engloba outra categoria de sistemas fortemente correlacionados cujos microestados escalam como $W(N) \sim \nu^{N^\gamma}$ [$\nu > 1$; $0 < \gamma < 1$]. O “espaço de fases” desta classe é mais restrito do que o da classe exponencial, porém menos do que o da classe lei de potência, quer dizer, $N^\rho \ll \nu^{N^\gamma} \ll \mu^N$ para N grande. Agora, tanto S_{BG} quanto S_q são não extensivas. O funcional entrópico capaz de fornecer um resultado linear com o tamanho N para a classe exponencial esticada é o S_δ :

$$S_\delta = k_{\text{B}} \sum_{i=1}^W p_i \left[\ln \frac{1}{p_i} \right]^\delta \quad (6.4)$$

δ é um parâmetro real positivo, e para $\delta = 1$, $S_1 = S_{\text{BG}}$. A Fig. 6.1 exhibe o comportamento da

[¶]Um caminho possível: $\lim_{q \rightarrow 1} \ln_q x = \lim_{a \rightarrow 0} [x^a - 1]/a = \lim_{a \rightarrow 0} [e^{a \ln x} - 1]/a = \lim_{a \rightarrow 0} [(1 + a \ln x + \dots) - 1]/a = \ln x$.

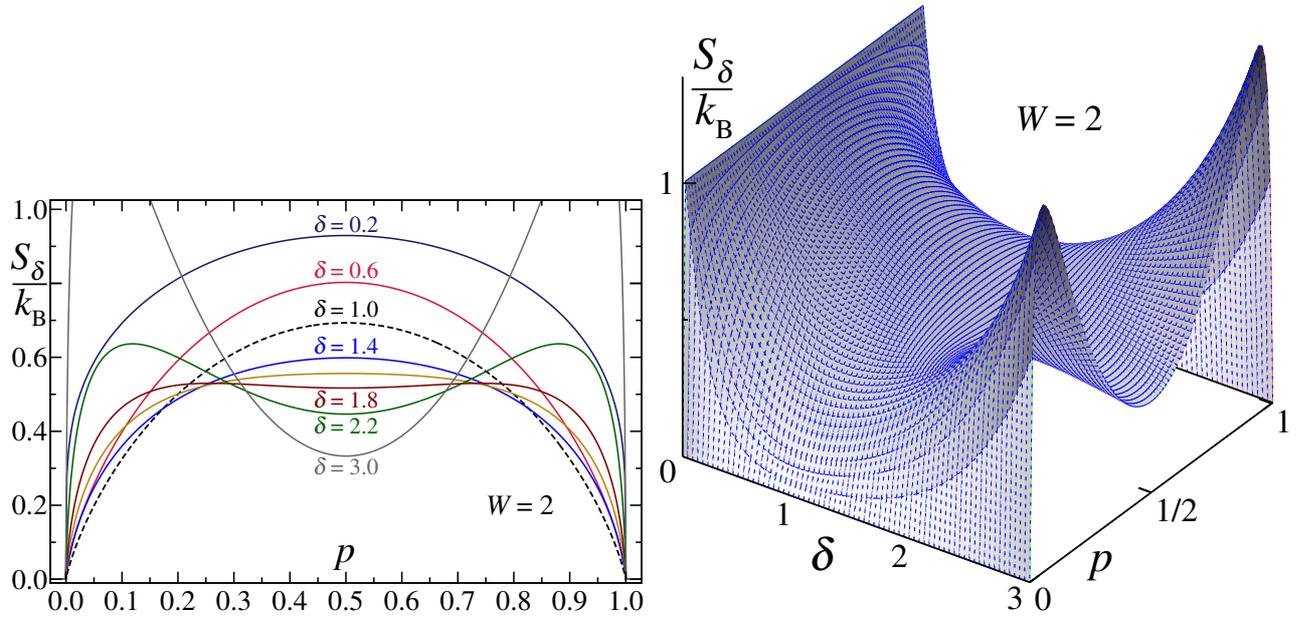


Fig. 6.1: Entropia $S_\delta = S_\delta(p)$ de um sistema binário [i.e., $W=2$, $p_1=p$, $p_2=1-p$ na Eq. (6.4)] em função da probabilidade p e em função de p e δ . $S_\delta(p)$ é côncava sempre que $0 < \delta \leq 1 + \ln 2 \approx 1.693$.

entropia S_δ de um sistema binário. Otimizando a Eq. (6.4) submetida ao vínculo $\sum p_i = 1$, encontramos que o extremo de S_δ ocorre também quando $p_i = 1/W \forall i$. Nesta situação equiprovável, temos $S_\delta = k_B [\ln W]^\delta$, então $S_\delta \propto N$ para o valor específico $\delta = 1/\gamma > 1$ [consistentemente, $\gamma \rightarrow 1$ implica $\delta = 1$, porque a classe exponencial esticada recai na exponencial]. O valor $\delta = 1/\gamma$ proporciona uma entropia extensiva mesmo quando $W \sim \phi(N)\nu^{N^\gamma}$, com $\phi(N)$ representando qualquer função que satisfaça $\ln \phi(N)/N^\gamma = 0$ no limite $N \rightarrow \infty$ [e.g., $\phi(N) \propto N^\rho$]. Na equiprobabilidade, a seguinte relação conectando S_δ e S_{BG} se verifica:

$$S_\delta = k_B [\ln W]^\delta \Rightarrow \frac{S_\delta}{k_B} = \left[\frac{S_{BG}}{k_B} \right]^\delta \quad (6.5)$$

donde segue que $S_\delta > S_{BG}$ sempre que $W > 2$ e $\delta > 1$. Considerando dois sistemas probabilísticos independentes, é imediato verificar que o funcional S_δ é não aditivo:

$$S_\delta(A+B) = k_B \sum_{i=1}^{W^A} \sum_{j=1}^{W^B} p_{ij}^{A+B} \left[\ln \frac{1}{p_{ij}^{A+B}} \right]^\delta \neq S_\delta(A) + S_\delta(B)$$

Expressar $S_\delta(A+B)$ envolvendo $S_\delta(A)$ e $S_\delta(B)$ analogamente ao feito com S_q na Eq. (6.3) não é tão simples[¶]. Contudo, na situação equiprovável, a equação anterior pode ser escrita como:

$$S_\delta(A+B) = \left\{ [S_\delta(A)]^{1/\delta} + [S_\delta(B)]^{1/\delta} \right\}^\delta \quad (p_{ij}^{A+B} = p_i^A p_j^B = 1/W^{A+B} = 1/W^A W^B)$$

[¶]Poderíamos usar a série binomial:

$$\frac{S_\delta(A+B)}{k_B} = \sum_{i=1}^{W^A} \sum_{j=1}^{W^B} \sum_{k=0}^{\infty} \binom{\delta}{k} p_i^A p_j^B [-\ln p_i^A]^k [-\ln p_j^B]^{\delta-k} = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{\delta}{k} \frac{S_k(A)}{k_B} \frac{S_{\delta-k}(B)}{k_B}$$

mas a convergência precisa ser avaliada com cuidado.

Tab. 6.1: Relação entre classe de correlação e extensividade da entropia. $W(N)$ representa o número de microestados de um sistema de N elementos. A *classe exponencial* é caracterizada por $W \sim \mu^N$, e a extensividade é obtida com S_{BG} . A extensividade da *classe lei de potência*, em que $W \sim N^\rho$, e da *classe exponencial esticada*, em que $W \sim \nu^{N^\gamma}$, é alcançada respectivamente com S_q e S_δ para os valores específicos de q e δ indicados.

	ENTROPIA		
$W(N)$ ($N \rightarrow \infty$)	S_{BG} (ADITIVA)	S_q ($q \neq 1$) (NÃO ADITIVA)	S_δ ($\delta \neq 1$) (NÃO ADITIVA)
$\sim \mu^N$ ($\mu > 1$)	EXTENSIVA	NÃO EXTENSIVA	NÃO EXTENSIVA
$\sim N^\rho$ ($\rho > 0$)	NÃO EXTENSIVA	EXTENSIVA ($q = 1 - 1/\rho$)	NÃO EXTENSIVA
$\sim \nu^{N^\gamma}$ ($\nu > 1$; $0 < \gamma < 1$)	NÃO EXTENSIVA	NÃO EXTENSIVA	EXTENSIVA ($\delta = 1/\gamma$)

A Tab. 6.1 organiza a discussão desta seção, reunindo as três classes de correlação [exponencial $W \sim \mu^N$, lei de potência $W \sim N^\rho$ e exponencial esticada $W \sim \nu^{N^\gamma}$] e os três funcionais entrópicos [S_{BG} , S_q e S_δ], indicando qual funcional confere a sistemas de determinada classe uma entropia extensiva. Embora a discussão tenha se baseado na situação equiprovável [sistema isolado], esperamos que suas conclusões estendam-se a distribuições de probabilidade [ou matrizes densidades] arbitrárias, como ocorre, para o caso de S_q , com a cadeia quântica da Sec. 4.14.1 e os modelos probabilísticos abordados nas Refs. [99, 168].

6.2 Entropia $S_{q,\delta}$

Podemos unificar as entropias S_q e S_δ no funcional de dois parâmetros $S_{q,\delta}$:

$$S_{q,\delta} = k_B \sum_{i=1}^W p_i \left[\ln_q \frac{1}{p_i} \right]^\delta = k_B \sum_{i=1}^W s(p_i, q, \delta) \quad (6.6)$$

$S_{q,1}$, $S_{1,\delta}$ e $S_{1,1}$ recuperam, respectivamente, S_q , S_δ e S_{BG} , e exceto quando $(q, \delta) = (1, 1)$, esse novo funcional é não aditivo. É imediato obter $s(1, q, \delta) = 0$ para qualquer q e qualquer $\delta > 0$. Quando $p \rightarrow 0$, os seguinte limites se verificam para $\delta > 0$:

$$\lim_{p \rightarrow 0^+} s(p, q, \delta) = \begin{cases} 0 & \text{se } q \geq 1 \text{ e } \delta > 0 \\ 0 & \text{se } q < 1 \text{ e } \delta(1-q) < 1 \\ (1-q)^{-\delta} & \text{se } q < 1 \text{ e } \delta(1-q) = 1 \\ \infty & \text{se } q < 1 \text{ e } \delta(1-q) > 1 \end{cases} = \begin{cases} 0 & \text{se } \delta(1-q) < 1 \\ (1-q)^{-\delta} & \text{se } \delta(1-q) = 1 \\ \infty & \text{se } \delta(1-q) > 1 \end{cases} \quad (6.7)$$

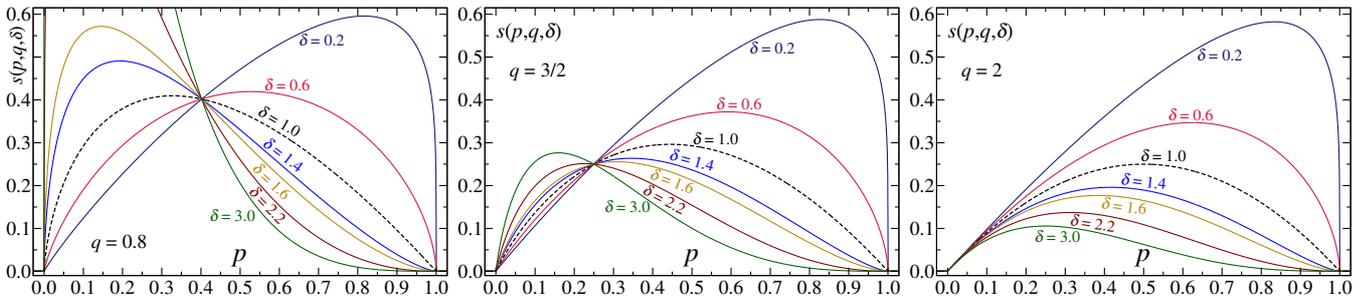


Fig. 6.2: Função $s(p, q, \delta)$ definida pela Eq. (6.6) para combinações de q e δ . Essa função é côncava para qualquer $q > 0$ apenas se $0 < \delta \leq 1$, $s(0, q, \delta) = (1, q, \delta) = 0$ apenas se $\delta(1-q) < 1$, e sob esta condição, o máximo de $s(p, q, \delta)$ ocorre em $p' = e_q^{-\delta}$, valendo neste ponto $s(p', q, \delta) = \delta^\delta [\exp_q(-\delta)]^{1-(1-q)\delta}$. Para $q < 2$ fixo, e valores δ 's tais que $\delta(1-q) < 1$, funções $s(p, q, \delta)$ e $s(p, q, \delta')$ se encontram em $p = 1/e_q$ [além de em $p = 0$ e $p = 1$; caso $q = 2$, $p = 1/e_2 = 0$].

Portanto, para que $s(0, q, \delta) = 0$ se cumpra, como ocorre com S_{BG} e S_q com $q > 0$, é necessário impor a condição $\delta(1-q) < 1$ ao funcional $S_{q,\delta}$ sempre que $q < 1$; satisfazendo esta condição, $s(p, q, \delta)$ tem seu máximo em $p = e_q^{-\delta}$. As Figs. 6.2 e 6.3 exibem o comportamento da função $s(p, q, \delta)$ e da entropia $S_{q,\delta}$ de um sistema binário para algumas combinações dos parâmetros q e δ .

Otimizando a Eq. (6.6) submetida ao vínculo de normalização $\sum p_i = 1$, concluímos que o extremo de $S_{q,\delta}$ também ocorre para $p_i = 1/W \forall i$, e neste caso:

$$S_{q,\delta} = k_B [\ln_q W]^\delta \quad (6.8)$$

Considerando configurações microscópicas escalando com N de forma bastante geral:

$$W(N) \sim N^\rho \nu^{N^\gamma} \quad \text{com:} \quad \rho \geq 0, \quad 0 \leq \gamma \leq 1 \quad \text{e} \quad \nu > 1 \quad (\gamma = 1 \Rightarrow \rho = 0) \quad (6.9)$$

a entropia $S_{q,\delta}$ é extensiva para $(q, \delta) = (1, 1)$ quando $(\rho, \gamma) = (0, 1)$ [classe exponencial; notar que $\rho > 0$ é inadmissível se $\gamma = 1$, pois não há ocupação do espaço de fases maior do que a completa], e caso $\rho > 0$, para $(q, \delta) = (1 - 1/\rho, 1)$ quando $\gamma = 0$ [classe lei de potência] e para $(q, \delta) = (1, 1/\gamma)$ quando $0 < \gamma < 1$ [combinação das classes lei de potência e exponencial esticada].

O funcional S_δ definido na Eq. (6.4) foi proposto discretamente em [10] [footnote 11 na Pág. 69] visando uma entropia extensiva para sistemas da classe exponencial esticada, e discutido com mais detalhes posteriormente na Ref. [2], trabalho que também introduziu a entropia de dois parâmetros $S_{q,\delta}$ definida na Eq. (6.6). A mesma Eq. (6.4) que define S_δ foi descoberta independentemente por Ubriaco [169], inspirado pelo cálculo fracionário. Recentemente Ribeiro *et al.* [170, 171] estudaram as distribuições de probabilidade que otimizam S_δ e $S_{q,\delta}$ empregando outros vínculos além da normalização da probabilidade, relacionando esses funcionais, e as respectivas distribuições, a equações de Fokker-Planck não lineares apropriadas; trabalho realizado com S_q há alguns anos com importantes desdobramentos [*e.g.*, [29, 123] e suas referências]. Acrescenta-se que diversos funcionais de dois parâmetros são discutidos na literatura [ou mesmo de três [172]]. Particularmente

[¶]O limite $p \rightarrow 0$ de $s(p, q, 1) = s(p, q)$ diverge se $q < 0$, o que pode ser contornando excluindo estados de probabilidade nula da soma na Eq. (6.2), como discutido na Ref. [10, Cap. 3]. Porém, contanto que a condição $\delta(1-q) < 1$ seja respeitada, a divergência deixa de existir em $s(p, q, \delta)$, ampliando as fronteiras de investigação de valores de q negativos, ou mesmo nulo.

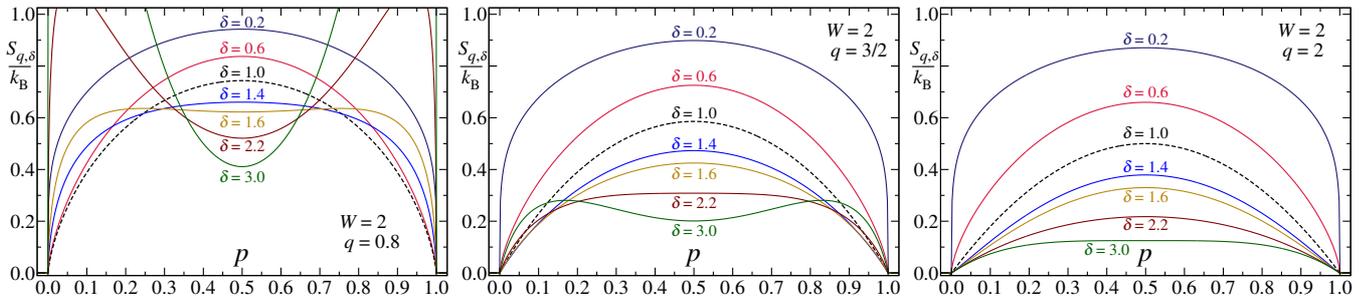


Fig. 6.3: Entropia $S_{q,\delta} = S_{q,\delta}(p)$ definida na Eq. (6.6) em função de p de um sistema binário. A concavidade é perdida para combinações de q e δ que violem as condições reunidas na Eq. (6.12) [notar que mesmo na região não côncava, $p = 1/2$ pode ser um máximo de $S_{q,\delta}(p)$, e.g., $(q, \delta) = (1.5, 1.4)$ e $(q, \delta) = (2.0, 1.4)$; a concavidade é perdida nos extremos $p \rightarrow 0$ e $p \rightarrow 1$ nestes casos].

Hanel & Thurner [173, 174] obtiveram uma expressão bastante geral $S_{c,d}$ de cujos funcionais S_δ e $S_{q,\delta}$ [e também S_q e S_{BG}] são casos assintóticos particulares. A próxima seção é dedicada à análise da concavidade de $S_{q,\delta}$, e um erro a esse respeito cometido na Ref. [2] é corrigido; na seguinte, é discutida uma possível relação entre S_δ e a entropia de Bekenstein & Hawking de buracos negros.

6.2.1 Análise da Concavidade

Para determinar a concavidade de $S_{q,\delta}$, olhemos a segunda derivada da função $s(p, q, \delta)$ definida a partir da Eq. (6.6):

$$s(p, q, \delta) = p \left[\ln_q \frac{1}{p} \right]^\delta \Rightarrow \frac{\partial^2 s(p, q, \delta)}{\partial p^2} = \frac{\delta [\ln_q 1/p]^\delta}{p [\ln_q p]^2} [\delta - 1 + q \ln_q p] \quad (6.10)$$

donde segue que $s(p, q, \delta)$ é côncava [*i.e.*, $\partial^2 s / \partial p^2 \leq 0$] sempre que $0 < \delta \leq 1 - q \ln_q p$ [o fator multiplicativo é positivo ou nulo $\forall q > 0$ e $p \in [0, 1]$, podendo ser $+\infty$ nos extremos]. Por conseguinte, a Eq. (6.6) é um funcional côncavo do jogo de probabilidade $\{p_i\}$ mediante combinação adequada dos parâmetros q e δ . Vamos definir $\delta(p, q) = 1 - q \ln_q p$. Com $p \in [0, 1]$, temos $\delta(p, q) \in (\infty, 1]$ caso $q \geq 1$ e $\delta(p, q) \in [1/(1-q) > 1, 1]$ caso $0 < q < 1$, em outras palavras, a derivada segunda de $s(p, q, \delta)$ é negativa para qualquer $p \in [0, 1]$ e $\forall q > 0$ apenas se $0 < \delta \leq 1$ [notar que o valor máximo de δ é definido em $p = 1$]. Essa estratégia para determinar a concavidade de $S_{q,\delta}$ a partir de $s(p, q, \delta)$ é baseada no fato de que a soma de funções côncavas é côncava [*e.g.*, $\partial^2 s(p, 1, 1) / \partial p^2 = -1/p < 0 \forall p \in [0, 1] \Rightarrow S_{BG}$ é côncavo; também $\partial^2 s(p, q, 1) / \partial p^2 = -q/p^{2-q} < 0 \forall p \in [0, 1]$ e $q > 0 \Rightarrow S_q$ é côncavo $\forall q > 0$]. Por tratar de forma independente cada termo na soma (6.6), tal procedimento não incorpora o vínculo $\sum p_i = 1$, é, portanto, neste caso, uma condição suficiente. Imaginemos então um sistema binário tipo Bernoulli com $p_1 = p$ e $p_2 = 1 - p$ de modo que a entropia $S_{q,\delta} = S_{q,\delta}(p)$ se escreva:

$$S_{q,\delta}(p) = k_B s(p, q, \delta) + k_B s(1 - p, q, \delta)$$

A derivada segunda é:

$$\frac{1}{k_B} \frac{\partial^2 S_{q,\delta}}{\partial p^2} = \frac{\delta [\ln_q 1/p]^\delta}{p [\ln_q p]^2} [\delta - 1 + q \ln_q p] + \frac{\delta [\ln_q 1/(1-p)]^\delta}{1-p [\ln_q (1-p)]^2} [\delta - 1 + q \ln_q (1-p)] \quad (6.11)$$

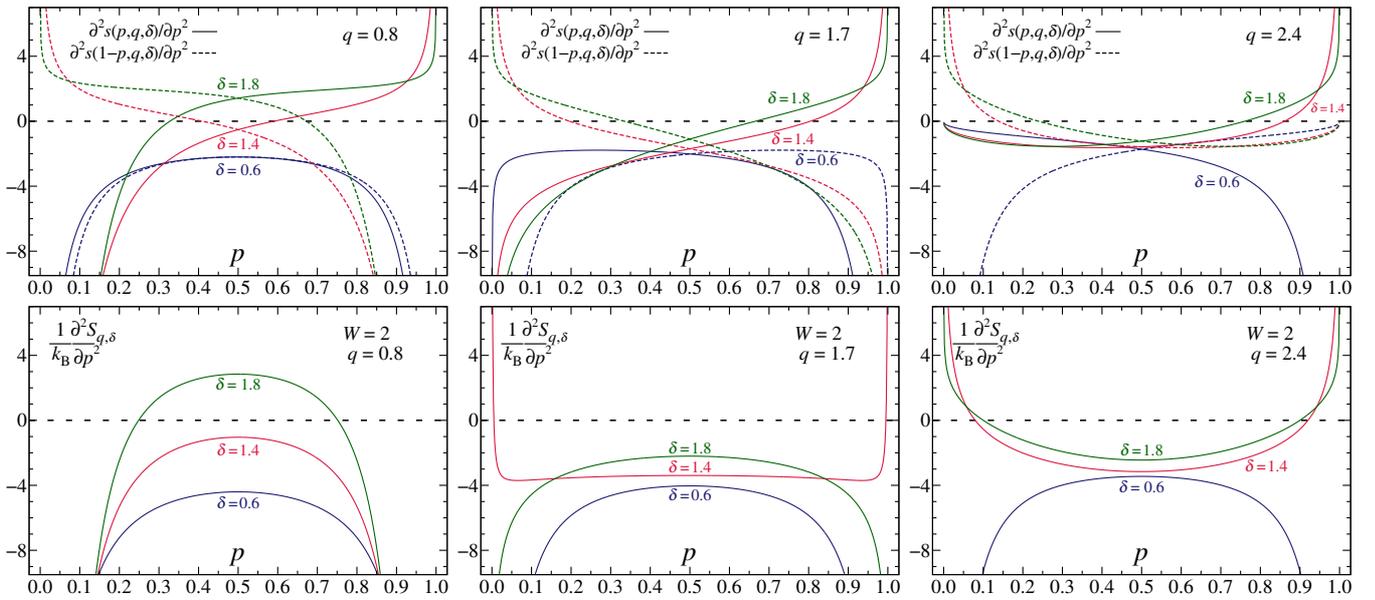


Fig. 6.4: **Acima:** Derivada segunda de $s(p, q, \delta)$ e $s(1-p, q, \delta)$ em função de p para algumas combinações de q e δ [ver Eq. (6.10)]. **Abaixo:** Derivada segunda de $S_{q,\delta}$ de um sistema binário [cf. Eq. (6.11), soma das curvas de cima]. Se os valores de q e δ respeitarem os intervalos na Eq. (6.12), a derivada segunda de $S_{q,\delta}(p)$ é negativa ou nula em $p \in [0, 1]$.

Quando $p = 1/2$ ambos os termos da expressão (6.11) são iguais e a segunda derivada se anula em $\delta = 1 - q \ln_q 1/2 > 1$ se $q > 0$. Para $p \neq 1/2$ há uma competição não muito simples entre a parte em função de $p_1 = p$ e aquela em função $p_2 = 1-p$ que depende dos valores de q e δ ; por exemplo, de acordo com a combinação entre q e δ , quando $p \rightarrow 0$, logo $1-p \rightarrow 1$, a parte em função de p pode ir a zero ou a $\pm\infty$, assim como a parte em função de $1-p$, como mostra a Fig. 6.4. Contudo, uma análise cuidadosa da soma na Eq. (6.11) para $\delta > 1$, bem mais delicada nos extremos de certeza $p \rightarrow 0$ e $p \rightarrow 1$ do que na região de equiprobabilidade em torno de $p = 1/2$, acrescida do fato que cada termo é negativo ou nulo individualmente quando $0 < \delta \leq 1$, revela as seguintes condições sobre os parâmetros q e δ para que a segunda derivada seja não positiva em $p \in [0, 1]$:

$$\frac{\partial^2 S_{q,\delta}}{\partial p^2} \leq 0 \Leftrightarrow \begin{cases} 0 < \delta \leq 1 & \text{e } q > 0 \\ 1 < \delta \leq 1 - q \ln_q 1/2 & \text{e } 0 < q \leq 1 \\ q \leq \delta \leq 1 - q \ln_q 1/2 & \text{e } 1 < q < 2 \end{cases} \quad (6.12)$$

Os intervalos na Eq. (6.12) estão representados na Fig. 6.5 e consistentemente não violam a condição $\delta(1-q) < 1$ associada à Eq. (6.7) mais acima [esses resultados e a Fig. 6.5 devem substituir os resultados correspondentes e a Fig. 2 do artigo [2], que estão *errados*].

Os intervalos na Eq. (6.12) estão associados a comportamentos distintos de $S_{q,\delta}(p)$ no que tange ao ponto p em que a função perde ou muda a concavidade. Avaliemos cada um deles separadamente. Se $0 < \delta \leq 1$, a segunda derivada é negativa ou nula $\forall q > 0$ em $p \in [0, 1]$. Se $\delta > 1$ e $0 < q \leq 1$, a mudança de concavidade de $S_{q,\delta}(p)$ ocorre, se δ ultrapassar a fronteira $\delta = 1 - q \ln_q 1/2$, na equiprobabilidade $p = 1/2$ [ver Figs. 6.3 e 6.4, esquerda]. Já para $\delta > 1$ e $1 < q < 2$, além de $p = 1/2$, surge outra fronteira em $\delta = q$ associada às regiões de certeza $p \rightarrow 0$ e $p \rightarrow 1$, de modo que se δ ultrapassa a bissetriz $\delta = q$ para a esquerda, a derivada segunda muda de sinal primeiro nesses extremos [Fig. 6.4, centro]. Esse resultado pode ser melhor compreendido ao olharmos os limites da

derivada segunda nas regiões de certeza $p \rightarrow 0$ e $p \rightarrow 1$. Olhando inicialmente os casos nos quais $q=1$ ou $\delta=1$ [ignorando k_B por um momento]:

$$\lim_{p \rightarrow 0^+} \frac{\partial^2 S_{q,\delta}}{\partial p^2} = \lim_{p \rightarrow 1^-} \frac{\partial^2 S_{q,\delta}}{\partial p^2} = \begin{cases} -\infty & \text{se } q=1 & \text{e } \delta > 0 \\ -\infty & \text{se } 0 < q < 2 & \text{e } \delta = 1 \\ -4 & \text{se } q=2 & \text{e } \delta = 1 \\ -q & \text{se } q > 2 & \text{e } \delta = 1 \end{cases}$$

Notar o valor finito dos limites quando $q \geq 2$. Para $q=1$, os limites são sempre negativos, mas δ não pode ultrapassar a fronteira de equiprobabilidade $\delta = 1 + \ln 2 \approx 1.7$ [valor indicado na Fig. 6.5], fronteira que não existe quando $\delta = 1$ [$S_{q,1} = S_q$ é sempre côncava $\forall q > 0$]. Agora, as demais combinações entre q e δ [mantendo alguns intervalos redundantes para facilitar a leitura]:

$$\lim_{p \rightarrow 0^+, 1^-} \frac{\partial^2 S_{q,\delta}}{\partial p^2} = \begin{cases} -\infty & \text{se } 0 < q \leq 1 & \text{e } \delta(1-q) < 1 \\ +\infty & \text{se } 0 < q < 1 & \text{e } \delta(1-q) \geq 1 \\ -\infty & \text{se } 0 < q < 2 & \text{e } 0 < \delta \leq 1 \\ +\infty & \text{se } 1 < q < 2 & \text{e } 1 < \delta < q \\ -\infty & \text{se } 1 < q < 2 & \text{e } \delta \geq q \\ -\infty & \text{se } q=2 & \text{e } 0 < \delta < 1 \\ +\infty & \text{se } q=2 & \text{e } 1 < \delta < q \end{cases} \begin{cases} \dots \\ -2 & \text{se } q=2 & \text{e } \delta = q \\ -2\delta & \text{se } q=2 & \text{e } \delta > q \\ -\infty & \text{se } q > 2 & \text{e } 0 < \delta < 1 \\ +\infty & \text{se } q > 2 & \text{e } 1 < \delta < 2 \\ +2 & \text{se } q > 2 & \text{e } \delta = 2 \\ 0 & \text{se } q > 2 & \text{e } \delta > 2 \end{cases}$$

Como podemos observar, a fronteira $\delta = q$ surge porque, entre $1 < q < 2$, o limite só é negativo caso $\delta \geq q$. Nestes intervalos, apesar dos limites negativos, δ não pode crescer muito pois encontra a fronteira de equiprobabilidade $\delta = 1 - q \ln_q 1/2$. Uma terceira fronteira existe em $q=2$, relacionada ao valor finito dos limites. Quando $q \geq 2$ e $\delta > 1$, ainda há combinações entre q e δ que tornam a Eq. (6.11) não positiva [e.g., se $q = \delta = 2$, temos, exatamente, $\partial^2 S_{q,\delta} / \partial p^2 = -2 \forall p \in [0, 1]$, não apenas nos extremos] mas que não foram incluídas na Eq. (6.12), daí o símbolo \Leftarrow invertido. Toda a região acima de $q=2$ deve ser excluída porque a Eq. (6.11) representa o caso particular $W=2$. Garantir que ela seja não positiva quando os limites são finitos, não garante a concavidade para valores de $W > 2$, situação em que a matriz Hessiana deve ser avaliada.

Determinar a concavidade por meio de um sistema binário soa particular, porém o resultado da Eq. (6.12) é mais geral. Isso ocorre porque a segunda derivada de $S_{q,\delta}$ tem comportamento análogo ao da Eq. (6.11) independentemente do valor de W . Vejamos um exemplo com $W=3$. Trabalhando com as variáveis p_1, p_2 e $p_3 = 1 - p_1 - p_2$, a segunda derivada de $S_{q,\delta} = S_{q,\delta}(p_1, p_2)$ se escreve [δ_{ij} = delta de Kronecker]:

$$\frac{1}{k_B} \frac{\partial^2 S_{q,\delta}}{\partial p_i \partial p_j} = \delta_{ij} \frac{\partial^2 s(p_i, q, \delta)}{\partial p_i^2} + \frac{\partial^2 s(1 - p_1 - p_2, q, \delta)}{\partial p_i \partial p_j} \quad \text{para } i, j = 1, 2 \quad (6.13)$$

Fixando $p_2 = 0$ quando $i = j = 1$ a expressão acima recupera a Eq. (6.11), e será negativa ou nula desde que os intervalos em (6.12) sejam respeitados. Fixando p_2 em outro valor maior que zero, $p_2 = a$ com $0 < a < 1$ por exemplo, a expressão (6.13) será simétrica em relação a $p_1 = (1-a)/2$ e não positiva nos intervalos da Eq. (6.12) com o fator constante $1/2$ substituído por $(1-a)/2$. Como $\ln_q 1/2 > \ln_q[(1-a)/2]$ para $q > 0$, garantir que a Eq. (6.13) seja não positiva quando $p_2 = 0$

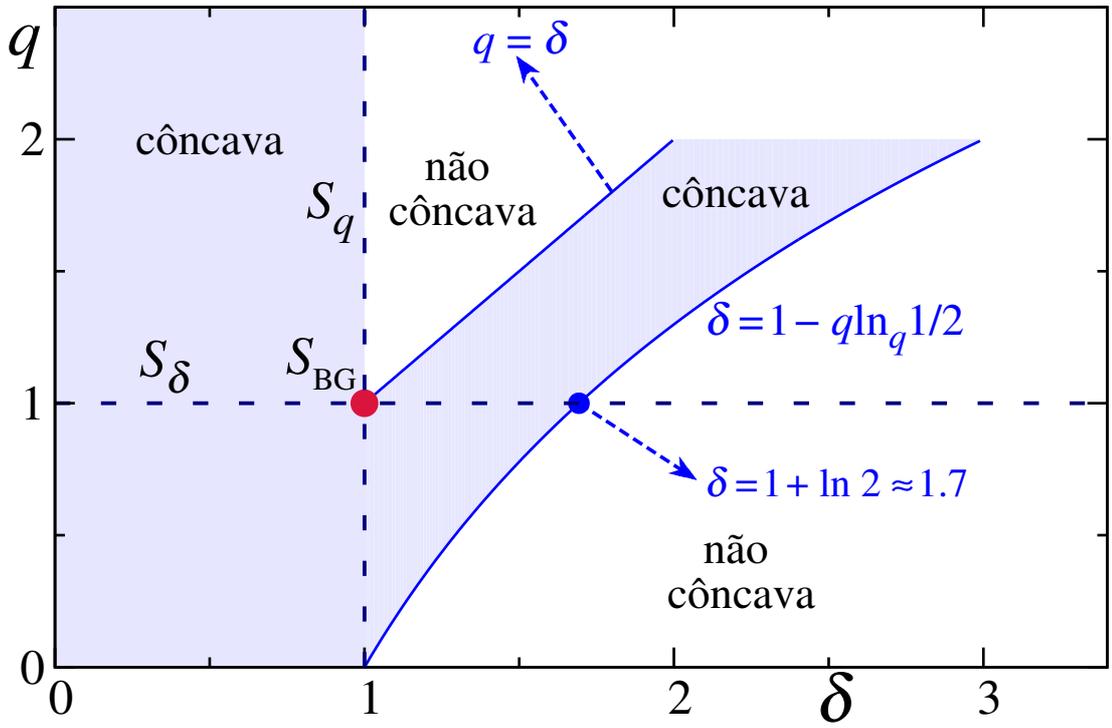


Fig. 6.5: Espaço de parâmetros da entropia $S_{q,\delta}$ com as regiões côncavas sombreadas [cf. Eq. (6.12)]. No ponto $(q, \delta) = (1, 1)$ a entropia de Boltzmann-Gibbs S_{BG} é recuperada. A linha tracejada $(q, \delta) = (q, 1)$ corresponde à entropia S_q , côncava $\forall q > 0$, e a linha $(q, \delta) = (1, \delta)$ corresponde à entropia S_δ , côncava em $0 < \delta \leq 1 + \ln 2 \approx 1.693$. À direita da fronteira $\delta = 1 - q \ln_q 1/2$, a concavidade é perdida na equiprobabilidade $p = 1/2$; à esquerda de $q = \delta$, a concavidade é perdida nas regiões de certeza $p \rightarrow 0$ e $p \rightarrow 1$ [ver discussão no texto].

significa garantir para qualquer outra escolha $p_2 = a > 0$. Essa discussão se mantém inalterada para demais valores de $W > 2$. Não é suficiente, entretanto, avaliar o sinal apenas dos elementos da diagonal $i = j$, a Hessiana completa deve ser considerada. Representando por $\delta_{ij} \mathcal{A}_i$ o primeiro termo do lado direito da Eq. (6.13) e por \mathcal{B} o segundo [notar que $\mathcal{B}_{ij} = \mathcal{B}_{ji} = \mathcal{B}_{ii} = \mathcal{B}$], a derivada segunda organizada matricialmente se escreve:

$$\frac{1}{k_B} \frac{\partial^2 S_{q,\delta}}{\partial p_i \partial p_j} = \begin{bmatrix} \mathcal{A}_1 + \mathcal{B} & \mathcal{B} \\ \mathcal{B} & \mathcal{A}_2 + \mathcal{B} \end{bmatrix} \quad (6.14)$$

Restringindo q e δ aos intervalos da Eq. (6.12), os elementos diagonais $\mathcal{A}_i + \mathcal{B}$ são não positivos, e \mathcal{B} pode ser positivo, negativo ou nulo. Para que a função $S_{q,\delta}(p_1, p_2)$ seja côncava, a matriz Hessiana (6.14) deve ser negativa semidefinida [i.e., $\mathcal{A}_i + \mathcal{B} \leq 0$ e $\text{Det} = (\mathcal{A}_1 + \mathcal{B})(\mathcal{A}_2 + \mathcal{B}) - \mathcal{B}^2 \geq 0$]. Neste caso particular com $W = 3$, e com os parâmetros q e δ respeitando a Eq. (6.12), é relativamente simples verificar que a matriz (6.14) é negativa semidefinida em $p_i \in [0, 1]$ com $p_1 + p_2 \leq 1$; a complexidade desses cálculos, contudo, aumenta significativamente com W , mesmo com a estrutura da Hessiana se mantendo [elementos da diagonal não positivos e os de fora da diagonal iguais]. O procedimento seguido então foi avaliar a positividade numericamente para alguns valores maiores de W . Em todos os casos considerados [até $W = 5$], foi verificado que a respectiva matriz Hessiana é sim negativa semidefinida, e com base nessa análise *assumiremos* que o mesmo resultado se estenda para W maior. Reforçamos que a função $s(p, q, \delta)$ é côncava $\forall q > 0$ apenas se $0 < \delta \leq 1$, e que o estudo que resultou nos intervalos da Eq. (6.12) foi feito com o vínculo $\sum p_i = 1$ incorporado.

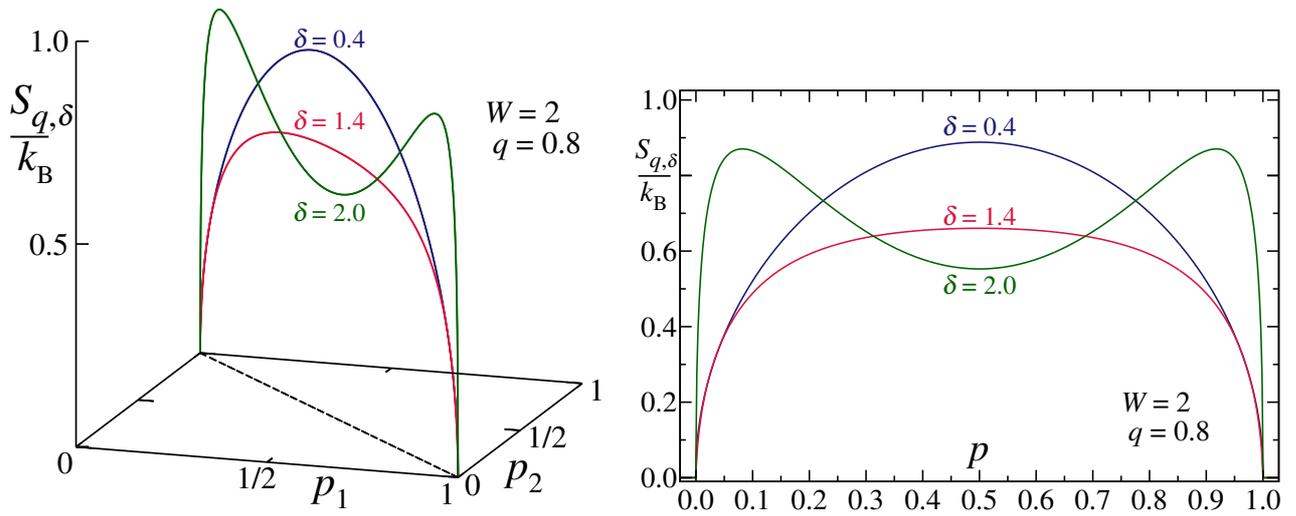


Fig. 6.6: Entropia $S_{q,\delta} = S_{q,\delta}(p_1, p_2)$ [esquerda, representação parametrizada] e $S_{q,\delta} = S_{q,\delta}(p) = S_{q,\delta}(p, 1-p)$ de um sistema binário para $q=0.8$ fixo e três valores de δ . O estudo da concavidade realizado no texto foi baseado em funções do tipo $S_{q,\delta} = S_{q,\delta}(p)$, com o vínculo $\sum p_i = 1$ incorporado.

Garantir a concavidade tratando $S_{q,\delta}(p_1, p_2, \dots, p_W)$, com $p_W = 1 - p_1 - p_2 - \dots - p_{W-1}$, como função de $W - 1$ variáveis, significa, neste caso [vínculo linear, problemas equivalentes, ver [175], Cap. 4], garantir que o extremo (6.8) é um máximo global da entropia $S_{q,\delta}$ [ver comparação entre $S_{q,\delta}(p_1, p_2)$ e $S_{q,\delta}(p) = S_{q,\delta}(p, 1-p)$ na Fig. 6.6].

6.3 Entropia S_δ e Buracos Negros

Longe de discutir profundamente esse fascinante tema, que recentemente teve sua fronteira ampliada por um de seus mais importantes contribuidores [176, 177], usaremos o buraco negro como possível sistema físico a ser abordado pela entropia S_δ definida na Eq. (6.4).

A entropia de Boltzmann-Gibbs tem como hipóteses de aplicabilidade subjacentes correlações fracas e ergodicidade. Discutir um buraco negro, sistema em que a interação gravitacional tem papel importante [logo, numa aproximação Newtoniana, $\alpha/d = 1/3$ em $d = 3$ dimensões espaciais, bem dentro da região de longo alcance pela ilustração da Fig. 3.1, Pág. 22], partindo desses pressupostos gerais, pode eventualmente não ser adequado do ponto de vista termodinâmico. Com efeito, o notável resultado de Bekenstein & Hawking [178–180] [Eq. (6.17) abaixo] revelou que a entropia de um buraco negro tem a característica peculiar de ser proporcional à área da superfície, no lugar do volume encerrado[¶], bastante diferente, segundo Carlip [185], do comportamento extensivo observado na termodinâmica convencional. É importante sublinhar que não há motivo para duvidar da exatidão deste resultado, quer dizer, a entropia de Boltzmann-Gibbs de um buraco negro é de fato proporcional à área, como diversos cálculos, empregando diversos métodos independentes, ao longo dos últimos 40 anos têm confirmado [185, 186]. A discussão é se essa entropia deve ser encarada como a entropia termodinâmica do sistema — os resultados de Bekenstein & Hawking são resultados estabelecidos.

Pressupondo equiprobabilidade, uma entropia proporcional à área de um sistema d -dimensional derivada do funcional aditivo S_{BG} significa essencialmente que $\ln W \propto L^{d-1}$ ($d \geq 2$). O sistema se

[¶]Definir o volume de um buraco negro é tarefa não trivial; ver, por exemplo, os trabalhos [181–184] com propostas recentes a respeito deste tema.

insere então na classe de correlação definida pela Eq. (6.9), de modo que $W = W(L)$ pode ser escrito como:

$$W(L) \sim \phi(L) \nu^{L^{d-1}} \quad \text{com:} \quad \ln \phi(L) / L^{d-1} \ll 1 \quad \text{quando} \quad L \rightarrow \infty$$

Portanto, a entropia $S_\delta = S_{1,\delta}$ com $\delta = 1/\gamma = d/(d-1)$ é extensiva neste caso. Também, decorre da Eq. (6.5) que:

$$\frac{S_{\delta=d/(d-1)}}{k_B} = \left[\frac{S_{\text{BG}}}{k_B} \right]^{d/(d-1)} \quad (6.15)$$

resultado que pode ser conectado com a entropia de Bekenstein-Hawking S_{BH} . Efetivamente, ao assumirmos que S_{BH} reflete configurações equiprováveis, a expressão anterior para $d=3$ fornece:

$$\frac{S_{\delta=3/2}}{k_B} = \left[\frac{S_{\text{BH}}}{k_B} \right]^{3/2} \quad (6.16)$$

em que:

$$S_{\text{BH}} = \frac{k_B}{4} \frac{A_{\text{H}}}{G\hbar/c^3} = \frac{k_B}{4} \frac{A_{\text{H}}}{\ell_{\text{P}}^2} \propto A_{\text{H}} \quad (\text{Entropia de Bekenstein \& Hawking}) \quad (6.17)$$

A_{H} representa a área do horizonte de eventos, e $\ell_{\text{P}} = \sqrt{G\hbar/c^3} \approx 1.6 \times 10^{-35} \text{ m}$, o comprimento de Planck. Aqui cabe sublinhar outro ponto[¶]: se o buraco negro for considerado um genuíno sistema bidimensional, *i.e.*, com $d = 2$ dimensões espaciais, fisicamente identificado apenas com a superfície do horizonte de eventos, o resultado da Eq. (6.17) é extensivo e deve ser reconhecido como a entropia termodinâmica do sistema. Pelo prisma termodinâmico então, não há nada de peculiar [185], intrigante [188], incomum [189] ou misterioso [190] em S_{BH} neste caso, e, estritamente, não estaríamos lidando com um problema típico de lei da área [153]. No entanto, se o buraco negro for visto como tridimensional — uma abordagem possível, dado que o espaço-tempo subjacente é D -dimensional, com $D = d + 1 = 3 + 1$, e o provável corpo que lhe deu origem era $d = 3$ -dimensional, uma estrela por exemplo —, o resultado extensivo é obtido pela entropia não aditiva S_δ com $\delta = 3/2$ como mostra a Eq. (6.16), e não pela expressão de Bekenstein & Hawking (6.17).

Podemos relacionar a discussão acima com a da Sec. 3.3, Pág. 20. Sabendo que em um buraco negro de Schwarzschild (3+1)-dimensional a energia depende linearmente da massa M_{bh} , a qual, por sua vez, escala com o comprimento L [o buraco negro de Schwarzschild é neutro e com momento angular nulo, sem cabelo mesmo; o raio de Schwarzschild vale $r_s = 2GM_{\text{bh}}/c^2$, e a área do horizonte, $A_{\text{H}} = 4\pi r_s^2$], temos, pela Eq. (3.9):

$$\epsilon = \theta + d = 1 \Rightarrow \theta = 1 - d \quad (6.18)$$

[¶]Ponto levantado por um dos Referees de [2]: “Area of a cross section of event horizon represents a state of the black hole at an instant of time (in a suitable coordinate system, valid on the horizon), then it is quite natural to consider black holes as 2 + 1 dimensional system. In fact, there are several ideas like holography etc which supports this idea, and then the apparent paradox discussed in this manuscript simply does not exist”. T. Padmanabhan é autor de trabalhos que tentam entender a origem microscópica da dependência com a área da entropia de um buraco negro. Particularmente na Ref. [187], é estudado como a dependência da entropia de um gás muda do volume à área à medida que o gás se aproxima do horizonte. A ele, essa questão não é muito natural.

Tratando o buraco negro como um genuíno sistema bidimensional ($d = 2$), vem $\theta = 1 - 2 = -1$, recuperando precisamente o escalamento da temperatura de Hawking T_H [$m_P = \sqrt{\hbar c/G} \approx 2.2 \times 10^{-8} K$ é a massa de Planck, e $T_P = m_P c^2/k_B \approx 1.4 \times 10^{32} K$ a temperatura de Planck]:

$$T_H = \frac{1}{k_B} \frac{\hbar c^3}{8\pi G M_{\text{bh}}} = \frac{T_P}{8\pi} \frac{m_P}{M_{\text{bh}}} \propto \frac{1}{M_{\text{bh}}} \propto \frac{1}{L} \quad (\text{Temperatura de Hawking}) \quad (6.19)$$

Neste caso, a entropia S_{BH} , a temperatura T_H e a energia acomodam-se, respectivamente, nos ramos extensivo, pseudo intensivo e pseudo extensivo da Fig. 3.1. Agora, considerando o buraco negro tridimensional ($d = 3$), vem, pela Eq. (6.18), $\theta = 1 - 3 = -2$, e a temperatura não escala da mesma maneira que a temperatura de Hawking T_H , mas sim como $T \propto 1/M_{\text{bh}}^2$. Como a entropia S_{BH} é não extensiva, a classificação da Fig. 3.1 baseada em argumentos termodinâmicos não é mais aplicável. Porém, adotando $S_{\delta=3/2}$ no lugar de S_{BH} , a extensividade é recuperada e a classificação da Fig. 3.1 é novamente válida, com a entropia $S_{\delta=3/2}$ e a temperatura[¶] caindo nos mesmos ramos de S_{BH} e T_H de um buraco negro visto como um objeto com $d = 2$ dimensões. A mesma discussão poderia ser repetida para um buraco negro (2+1)-dimensional, cuja entropia S_{BG} escala linearmente e a energia quadraticamente com o horizonte, que é $d = 1$ -dimensional [*e.g.*, Carlip [191], Cap. 12]; portanto, da Eq. (6.18) resulta $\theta = 2 - d$. Interpretando esse sistema como bidimensional ($d = 2$), a entropia S_{BG} é não extensiva, trabalharíamos então com a Eq. (6.15) com o valor específico $\delta = d/(d-1) = 2$ a fim de recuperar a extensividade [discussão completa em [2]]. Contudo, $\delta = 2$ viola os intervalos de concavidade da Eq. (6.12), impedindo, em princípio, o emprego de S_δ para caracterizar a entropia desse sistema, embora haja margem para se ir além nesta questão [192].

A ideia de discutir a entropia de um buraco negro (3+1)-dimensional por meio de S_δ , com $\delta = 3/2$ como mostra a Eq. (6.16), foi aplicada por Komatsu & Kimura [193] em um cenário cosmológico conhecido como cosmologia entrópica — modelo no qual o horizonte do universo tem entropia e temperatura, e o horizonte de eventos dá lugar ao horizonte de Hubble na Eq. (6.17). Análise análoga já vinha sendo desenvolvida com a entropia de Bekenstein & Hawking, com possíveis implicações na expansão acelerada do universo, mas deve ser observado que a natureza física do horizonte de eventos de um buraco negro não é a mesma do horizonte de Hubble. Esses autores produziram uma série de trabalhos sobre esse tema, ver a Ref. [194] e suas citações para os mais recentes desdobramentos. Reforçamos, por fim, que a conexão entre S_δ e S_{BH} foi realizada assumindo que o resultado de Bekenstein & Hawking (6.17) reflete configurações microscópicas equiprováveis [como se depreende, *e.g.*, já no *abstract* de [179]]. A relevância desta hipótese pode ser percebida ao considerarmos que a mesma hipótese aplicada à cadeia quântica da Sec. 4.14.1 resulta em um valor de q distinto — e errado — daquele visto na Eq. (4.18), Pág. 67 [resulta em $q = 1 - 3/c$, como discutido na Ref. [33]].

[¶]Talvez a forma mais simplória de “derivar” T_H seja expressar S_{BH} em função da massa, $S_{\text{BH}} = k_B 4\pi [M_{\text{bh}}/m_P]^2$, e escrever a primeira lei como $dE = c^2 dM = T dS$; logo $c^2/T = \partial S/\partial M$, donde segue a temperatura de Hawking (6.19): $T_H = T_P m_P/[8\pi M_{\text{bh}}]$. Repetindo este procedimento com S_δ , a Eq. (6.16) se escreve $S_{3/2} = k_B [4\pi]^{3/2} [M_{\text{bh}}/m_P]^3$, e a versão análoga da temperatura T_H é: $T = T_P/[3(4\pi)^{3/2}] [m_P/M_{\text{bh}}]^2 = [8\sqrt{\pi}/3] T_H^2/T_P$. Coloquemos números. Considerando um buraco negro de massa solar, $M_{\text{bh}} = M_\odot \approx 2 \times 10^{30} K$, vem $T_H \approx 6 \times 10^{-8} K$, que é um valor bastante pequeno; porém, a temperatura associada a $S_{3/2}$ é ainda menor: $T \approx 10^{-46} K$. Este valor extremamente pequeno de T é um indicativo de que esta analogia deve ser olhada com cautela.

6.4 Entropia S_q e Altas Energias

A percepção de que a mecânica estatística não extensiva poderia ser útil em física de partículas elementares surgiu já na década de 1990 [195, 196] e foi impulsionada com o trabalho de Bediaga, Curado & Miranda [197], imediatamente seguido de outros [198–200]. Inspirando-se em ideias desenvolvidas principalmente por Hagedorn [201–204], baseadas naturalmente na termoestatística de Boltzmann-Gibbs [década de 1960], Bediaga *et al.* reproduziram as distribuições de momento transverso que se afastavam do comportamento exponencial Boltzmanniano empregando S_q no lugar de S_{BG} . Essa extensão do modelo original de Hagedorn culminou com os resultados recentes do LHC, quando foi verificado que o acordo com dados experimentais estendia-se por 14 décadas [Fig. 6.7 a seguir].

Negligenciando a estatística quântica e assumindo potencial químico nulo, a abordagem de Hagedorn em sua formulação mais simples tem como um de seus elementos uma seção de choque diferencial invariante de partícula única da seguinte forma:

$$E \frac{d^3\sigma}{dp^3} \propto E \frac{d^3N}{dp^3} = \frac{\gamma V}{(2\pi\hbar)^3} E e^{-E/k_B T_0} \quad (\text{Invariant Yield}) \quad (6.20)$$

E , a energia, e $p = |\mathbf{p}|$, o momento, são componentes do quadri-vetor $(E/c, \mathbf{p})$ tal que $m^2 c^2 = (E/c)^2 - p^2$ é a massa de repouso [c é a velocidade da luz]; γ é o coeficiente de degenerescência [de spin por exemplo], V é volume da região de interação [volume da fonte] e T_0 é conhecida como temperatura de Hagedorn [205]. Em colisões suficientemente energéticas, forma-se uma região densa e quente que atinge por um curto período o equilíbrio térmico antes de explodir [ou decair], podendo originar milhares de partículas. Essa gota ou caroço [*drop, lump*] de matéria elementar foi chamada por Hagedorn de *fireball*, o qual, para além do nome, funcionou como conceito simplificador chave de sua teoria. A temperatura T_0 independe da energia e foi interpretada como temperatura última da matéria, com valor estimado da ordem da massa do pión, $k_B T_0 \approx m_\pi c^2 \approx 160$ MeV, mas atualmente é associada ao desconfinamento dos quarks, origem do plasma de quarks e glúons[¶]. A teoria de Hagedorn contém outros elementos e seu amadurecimento até o que ficou conhecido como *statistical bootstrap model* se deu ao longo de vários trabalhos [review do autor [204]]. Em muitos aspectos é um formalismo macroscópico, que não envolve uma descrição microscópica precisa da interação ou dos constituintes do sistema, aplicável tanto em colisões de partículas [*e.g.*, próton-próton= pp] quanto de íons pesados [*e.g.*, núcleos de chumbo, ouro].

Retomando a Eq. (6.20), o momento das partículas produzidas na colisão é usualmente decomposto em uma componente paralela ao feixe, componente longitudinal p_L , e em outra no plano perpendicular à direção do feixe, componente transversa \mathbf{p}_T , de modo que $p = |\mathbf{p}| = \sqrt{p_T^2 + p_L^2}$ [*e.g.*, [207], Caps. 5 e 8, [210], Caps. 2 e 3, ou [208]]. Introduzindo o ângulo azimutal φ , medido ao redor do eixo do feixe [no plano que contém \mathbf{p}_T], o elemento de volume neste sistema cilíndrico

[¶]O mais recente *review* do PDG [206] tabela a massa dos mésons carregados e neutro como $(m_{\pi^\pm}, m_{\pi^0}) \approx (139.57, 134.98)$ MeV/ c^2 , e resultados teóricos indicam como temperatura de desconfinamento valores da ordem de $k_B T \approx 170$ MeV, ou $T \approx 2 \times 10^{12}$ K [207, 208]. Quando Hagedorn iniciou o desenvolvimento de seu modelo, a existência dos quarks e a cromodinâmica não eram temas estabelecidos. O trabalho original foi publicado em 1965 na *Nuovo Cimento, Suppl.* Vol. 3, Págs. 147–186 [artigo destacado como *Citation Classic* na *Current Contents* [209] em 1984]. Esse artigo não está disponível online, mas um *report* de mesmo título pode ser acessado no *CERN Document Server* [201], possivelmente a versão enviado ao jornal. Outros trabalhos de Hagedorn estão disponíveis neste sítio [URL: <http://cds.cern.ch>], alguns publicados “apenas” como notas técnicas [*reports*] do CERN.

fica $d^3p = d^2p_T dp_L = p_T dp_T d\varphi dp_L$, ou, assumindo isotropia na produção azimutal, $d^3p = 2\pi p_T dp_T dp_L$. É útil também substituir a componente longitudinal p_L pela *rapidity*. A *rapidity* y é uma quantidade adimensional definida por:

$$y = \frac{1}{2} \ln \left[\frac{E + p_L c}{E - p_L c} \right] \Rightarrow \begin{cases} E = \sqrt{p_T^2 c^2 + m^2 c^4} \cosh y \\ p_L = \sqrt{p_T^2 + m^2 c^2} \sinh y \end{cases} \Rightarrow c dp_L = E_T \cosh y dy = E dy \quad (6.21)$$

Trabalhando com c explícito, cabe definir $E_T = \sqrt{p_T^2 c^2 + m^2 c^4}$, que corresponde à familiar massa transversa m_T quando $c=1$ e representa a energia da partícula quando $p_L = y = 0$, *i.e.*, quando $\mathbf{p} = \mathbf{p}_T$. Após uma integração sobre φ , o *invariant yield* (6.20) em termos da *rapidity* então fica [escrevendo $\beta = 1/k_B T_0$ para encurtar]:

$$E \frac{d^3N}{dp^3} = E \frac{d^3N}{d^2p_T dp_L} = \frac{c}{p_T} \frac{d^3N}{dp_T dy d\varphi} \Rightarrow E \frac{d^3N}{dp^3} = \frac{E}{2\pi p_T} \frac{d^2N}{dp_T dp_L} = \frac{c}{2\pi p_T} \frac{d^2N}{dp_T dy} = \frac{\gamma V}{(2\pi\hbar)^3} E e^{-\beta E}$$

Uma nova integração fornece a distribuição de momento transverso:

$$\frac{1}{2\pi p_T} \frac{dN}{dp_T} = \frac{\gamma V}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_L e^{-\beta E} = \frac{1}{c} \frac{\gamma V}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} dy E e^{-\beta E} = \frac{1}{c} \frac{2\gamma V}{(2\pi\hbar)^3} E_T K_1(\beta E_T) \quad (6.22)$$

Nesta equação, $K_1(x)$ representa a função modificada de Bessel de segunda espécie de ordem $n=1$, também chamada de função modificada de Hankel:

$$K_n(x) = \int_0^\infty dy \cosh(ny) e^{-x \cosh y} \sim \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x} \left[1 + \frac{4n^2 - 1}{8x} + \mathcal{O}(x^{-2}) + \dots \right] \quad (6.23)$$

mais à direita temos a expansão assintótica válida para x grande [Cap.14 de [211], por exemplo]. No regime em que $\beta E_T = \beta \sqrt{p_T^2 c^2 + m^2 c^4} \approx \beta p_T c \gg 1$, retendo apenas o primeiro termo na expansão (6.23), obtemos da Eq. (6.22):

$$\frac{1}{2\pi p_T} \frac{dN}{dp_T} = \frac{1}{c} \frac{2\gamma V}{(2\pi\hbar)^3} E_T K_1(\beta E_T) \approx \frac{1}{c} \frac{2\gamma V}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{\frac{\pi p_T c}{2\beta}} e^{-\beta p_T c} \propto p_T^{1/2} e^{-p_T c / k_B T_0}$$

que mostra que a distribuição de momento transverso deve decair exponencialmente. Tal comportamento é realmente observado em colisões com energia de centro de massa[¶] menor ou da ordem de $c^2 \sqrt{s} \approx 10$ GeV [198, 213], mas deixa de o ser a energias maiores. Essa discordância foi percebida há muitos anos [Cap.6 de [213]; [214] e referências] e algumas vezes contornada por meio de fórmulas empíricas ou semiempíricas sem sustentação termoestatística firme. Expressão empírica, notou-se [203, 215], que se adéqua particularmente bem aos dados em larga faixa de valores de p_T é a lei de potência $(1 + p_T)^{-n}$, ou seja, uma q -exponencial.

[¶]Na colisão de duas partículas de quadrimomento $(E_i/c, \mathbf{p}_i)$ o invariante de Mandelstam $c^2 s = (E_1/c + E_2/c)^2 - (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)^2$ quantifica o conteúdo energético da reação. No referencial em que $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = 0$ [centro de massa ou centro de momento], $c^2 \sqrt{s} = (E_1 + E_2)$ é a energia total, chamada *energia de centro de massa*, e representa a energia disponível para formar novas partículas por exemplo. Aqui, são analisados dados com energia de centro de massa até $c^2 \sqrt{s} = 7$ TeV = 7×10^{12} eV, provenientes do *Run 1* (2008–2013) do LHC, que alcançou $c^2 \sqrt{s} = 8$ TeV. Atualmente, após o *Long Shutdown 1* (2013–2015), está em andamento o *Run 2*, e o LHC opera até a energia máxima de $c^2 \sqrt{s} = 13$ TeV [informações colhidas em [212] e <http://press.cern/backgrounders/lhc-season-2-facts-figures>].

O trabalho de Bediaga *et al.* [197], e também o de Beck [198], consistiu, em grande síntese, na repetição dos passos do parágrafo anterior substituindo a exponencial na Eq. (6.20) por uma q -exponencial elevada à potência q — consequentemente uma lei de potência naturalmente emerge como distribuição de momento transverso. A razão pela qual foi usada uma q -exponencial elevada a q está ligada à media de escort como vínculo de otimização da entropia. Embora muitos autores continuem trabalhando assim [216–220], outros abandonaram a potência q e empregaram apenas a q -exponencial [214, 221–224], caminho que seguiremos logo adiante. Cabe aqui comentários adicionais. Principalmente após o trabalho de Plastino *et al.* [28], discute-se a equivalência, mediante redefinição simples de parâmetros [*e.g.*, $q \rightarrow 1/q$], entre as distintas maneiras de impor os vínculos no procedimento de otimização de S_q [uma dessas maneiras foi esboçada na Sec. 1.1.1, Pág. 5]. Ambas as alternativas portanto, q -exponencial pura ou q -exponencial potência q , podem, em princípio, ser justificadas na estrutura da mecânica estatística não extensiva. Essa equivalência de forma alguma descarta a importância da média de escort na formulação geral da teoria, e nem em exemplos específicos, como revela a análise da q -kurtosis na Sec. 4.7, Pág. 43 [referências importantes sobre esta questão são [27, 28] e a Sec. 3.6 de [10]; ver também [216] e suas citações].

Trocando a exponencial pela q -exponencial na Eq. (6.20), vem:

$$E \frac{d^3 N}{dp^3} = \frac{c}{2\pi p_T} \frac{d^2 N}{dp_T dy} = \frac{\gamma V}{(2\pi\hbar)^3} E e_q^{-E/k_B T} \quad (6.24)$$

Os resultados experimentais analisados são limitados a uma janela de *rapidity* estreita em torno de $y \approx 0$. Alguns trabalhos teóricos [216–219, 222] adotam $y = 0$ como aproximação para descrever esses dados, logo $E = E_T \cosh y = E_T$ neste caso. Outra abordagem é considerar a distribuição de p_T independente da distribuição de *rapidity*, dN/dy , que é aproximadamente constante na região central [208, 218, 225, 226]. Trabalhos que seguem essa estratégia [221, 223, 227] reescrevem a Eq. (6.24) como [C é constante]:

$$E \frac{d^3 N}{dp^3} = \frac{c}{2\pi p_T} \frac{d^2 N}{dp_T dy} = C \frac{dN}{dy} e_q^{-E_T/k_B T} = C \frac{dN}{dy} \left[1 - (1-q) \frac{E_T}{k_B T} \right]^{\frac{1}{1-q}} \quad (6.25)$$

que é essencialmente a *parametrização de Tsallis* no jargão de grandes colaborações experimentais [228–230]. Vamos agrupar o pré-fator da Eq. (6.25) na constante $A = CdN/dy$ e escrever:

$$E \frac{d^3 N}{dp^3} = \frac{c}{2\pi p_T} \frac{d^2 N}{dp_T dy} = A e_q^{-E_T/k_B T} \quad \text{com:} \quad E_T = \sqrt{p_T^2 c^2 + m^2 c^4} \quad \text{e:} \quad m = m_\pi \quad (6.26)$$

A Eq. (6.26) acima foi a escolhida como função de ajuste e o resultado é apresentado na Fig. 6.7, o acordo com os dados experimentais impressiona [da ordem de 14 décadas, para CMS 7 TeV]. Os parâmetros de ajuste foram A , q e T , seus valores estão reunidos na Tab. 6.2; notar, entretanto, que uma vez fixados q e T , a constante $A = A(q, T, y \approx 0) = A(q, T)$ fica determinada pela normalização da distribuição, restando efetivamente dois parâmetros livres. A massa m inserida em E_T foi a do pión carregado, arredondada para $m_\pi = 140 \text{ MeV}/c^2$ [206], na linha de outros[¶] trabalhos [198, 214, 219, 221, 229, 232].

[¶]Particular referência a este respeito é o artigo da CMS [231], que aborda dificuldades técnicas envolvidas na identificação das partículas [um trecho: “(...) pions and kaons cannot be unambiguously distinguished at higher momenta (...)”].

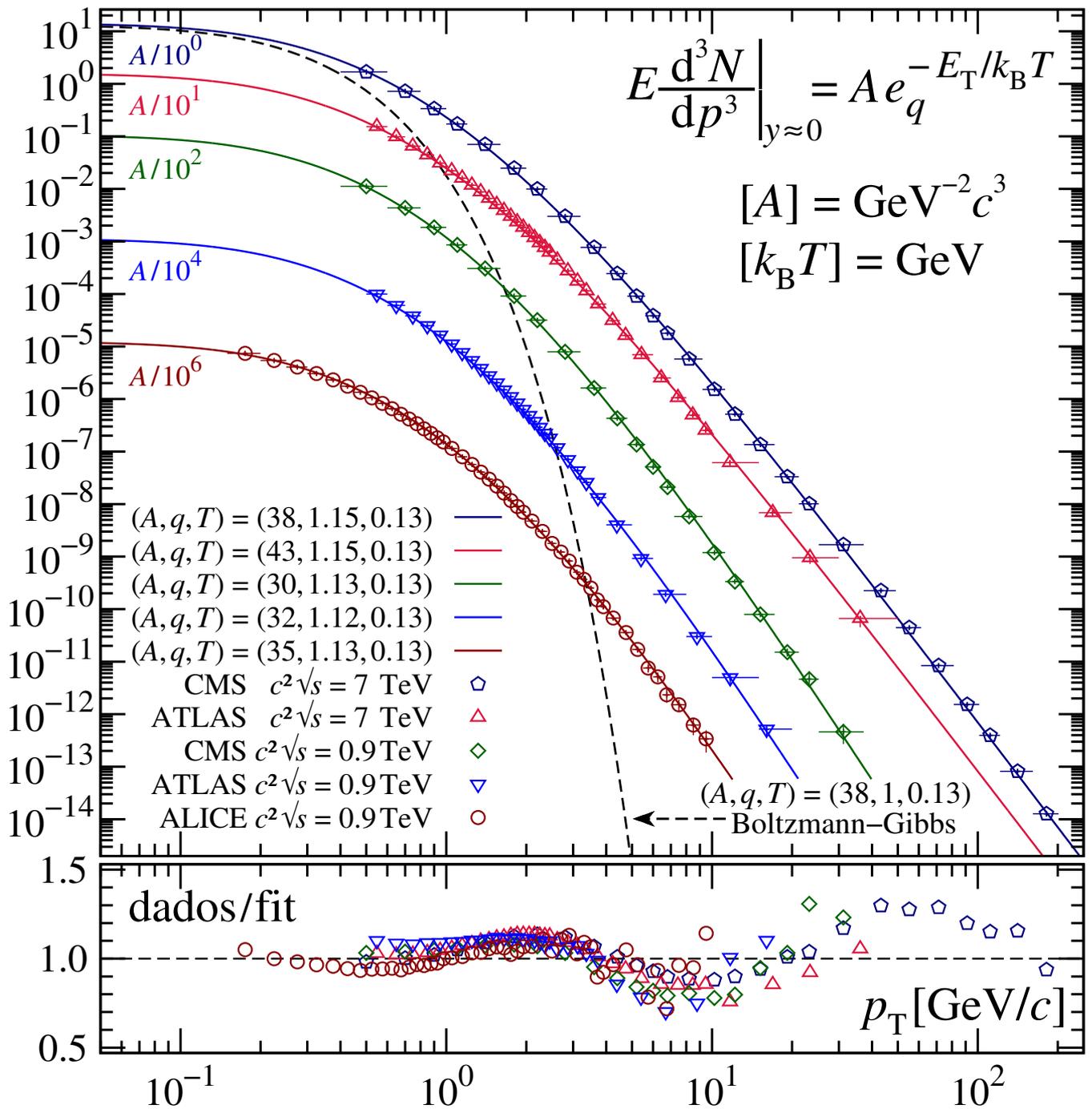


Fig. 6.7: **Acima:** Seção de choque diferencial invariante em função do momento transverso p_T de hádrons produzidos em colisões pp . Pontos são dados experimentais na região central $y \approx 0$; linhas cheias são ajustes com a Eq. (6.26). A massa usada em $E_T = \sqrt{p_T^2 c^2 + m^2 c^4}$ foi a do pión $m_\pi = 0.14 \text{ GeV}/c^2$. Para melhorar a visualização, dados e curvas analíticas foram divididos pelo fator constante indicado. A linha tracejada é o limite $q \rightarrow 1$ da Eq. (6.26) e ilustra a discordância entre curva e dados experimentais para p_T grande quando uma descrição similar é elaborada com a termoestatística de Boltzmann-Gibbs. **Abaixo:** Mesmos resultados representados na forma *dados/ajuste* em que um comportamento oscilatório pode ser percebido [mais detalhes no texto]. Incertezas de diferentes origens [sistemática, estatística] foram combinadas quadraticamente. Dados retirados de [232, ALICE], [233, CMS] e [234, ATLAS], ver Tab. 6.2.

Com respeito à parte superior da Fig. 6.7, o parâmetro q permanece em torno de $q \approx 1.1$, embora haja um tênue crescimento com a energia do centro de massa $c^2 \sqrt{s}$. Esse crescimento vai ao encontro de resultados semianalíticos que indicam um valor limite de q atingido a energias

extremamente altas, possivelmente perto de $q = 1.2$ [198, 223]. Em todos os caso analisados, o ajuste fornece uma temperatura T aproximadamente de $k_B T \approx 0.13$ GeV, valor comparável à massa do pión $m_\pi c^2 \approx 0.14$ GeV [notar que chamamos o parâmetro T de temperatura, chamá-lo de *temperatura efetiva* pode vir a ser mais apropriado, conforme discussão e referências na Sec 4.6.1, Pág. 39]. A linha tracejada, associada a $q=1$, *i.e.*, uma exponencial tradicional de $E_T/k_B T$, revela o quão discrepante é a presente análise de uma análise análoga por meio da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs quando p_T é suficientemente grande. Mais à frente, discutiremos a parte inferior da figura, na qual estão representados os mesmos resultados da parte superior na forma dados experimentais divididos pelo ajuste. Antes, avaliemos rapidamente um detalhe técnico.

A Fig. 6.7 contém dados das colaborações do LHC ALICE [232], CMS [233] e ATLAS [234]. No tocante à colaboração ATLAS, os dados reportados envolvem a *pseudorapidity* η e não a *rapidity* y . Especificamente, as colaborações ALICE e CMS realizaram medições relacionadas a $d^2N/dp_T dy$, enquanto a ATLAS trabalhou com $d^2N/dp_T d\eta$. Por este motivo, a seguinte transformação entre η e y foi necessária [210, 229]:

$$\eta = \frac{1}{2} \ln \left[\frac{p + p_L}{p - p_L} \right] \Rightarrow \begin{cases} p = p_T \cosh \eta \\ p_L = p_T \sinh \eta \end{cases} \Rightarrow \frac{d^2N}{dp_T d\eta} = \sqrt{1 - \frac{m^2 c^4}{E_T^2 \cosh^2 y}} \frac{d^2N}{dp_T dy} = \frac{cp}{E} \frac{d^2N}{dp_T dy}$$

Unificando esta transformação com a Eq. (6.26), vem:

$$E \frac{d^3N}{dp^3} = \frac{c}{2\pi p_T} \frac{d^2N}{dp_T dy} = \frac{c}{2\pi p_T} \frac{E}{cp} \frac{d^2N}{dp_T d\eta} = A e_q^{-E_T/k_B T} \quad (6.27)$$

Portanto, a fim de exibir adequadamente todos os resultados no mesmo gráfico, os dados da colaboração ATLAS foram multiplicados pela razão E/cp . Contudo, assumimos $y=0$ nesta multiplicação, resultando em $E/cp = E_T/cp_T \approx 1$ já para valores de p_T logo acima de $p_T = 1$ GeV/ c [da fato, fixando $m = m_\pi$ e $p_T = 1$ GeV/ c , segue $E_T/cp_T \approx 1.01$; notar também que, quando $p \gg mc \Rightarrow E \approx cp$, temos, olhando a Eq. (6.21), $y \approx \eta$], de modo que a transformação redundou numa diferença pequena [quase imperceptível no gráfico se $p_T > 1$ GeV/ c , na escala usada].

Na parte inferior da Fig. 6.7 os resultados são representados na forma *dados/ajuste* e, examinando atentamente, é possível notar uma oscilação periódica sobreposta ao comportamento em lei de potência principal da Eq. (6.26). Esse resultado merece destaque pelas ligações que suscita. Com efeito, como a abscissa é logarítmica, a oscilação é uma oscilação log-periódica, sugerindo algum tipo de estrutura hierárquica fractal no sistema de quarks e glúons onde os hádrons detectados foram produzidos [235–237]. Ao considerarmos que a associação entre fractais e a mecânica estatística não extensiva é notória desde sua origem, e que o conceito de autossimilaridade — uma das assinaturas de estruturas fractais — está contido na definição recursiva de *fireball* concebida por Hagedorn, emerge um quadro coerente que pode motivar novas investigações. Alguns estudos nesta direção já existem. Por exemplo, as oscilações log-periódicas foram preliminarmente discutidas nas Refs. [238, 239], trabalhos em que os autores foram capazes de reproduzi-las analiticamente basicamente permitindo que o índice q na Eq. (6.26) assumisse valores complexos. Mais recentemente,

Deppman [240] foi além, introduzindo a ideia de termofractal[¶].

A principal motivação que levou à escolha da Eq. (6.26) como função de ajuste foi a busca da mais simples expressão em conformidade com a termoestatística não extensiva capaz de descrever os dados na mais ampla faixa de valores de p_T . Como ficará mais claro a seguir, essa escolha permite uma interpretação simples em termos de um sistema relativístico bidimensional. A Eq. (6.26) é *exatamente a mesma* empregada nos^{¶¶} artigos [6–8]. Pela possível interpretação simples que dela decorre e pela visão simplificadora subjacente, essa abordagem foi classificada como uma descrição mecânico-estatística *no-hair* nestes trabalhos. Por tratar de tema investigado por inúmeras equipes teóricas e experimentais, é importante destacar a expressão empregada em virtude da variabilidade de alternativas encontradas na literatura [e da variabilidade de denominações também: parametrização de Tsallis, Pareto, Lévy, Hagedorn modificada e outras mais]. Ainda que algumas dessas alternativas sejam muito próximas uma das outras [e.g., substituir $E_T \rightarrow E_T - m$ na Eq. (6.26)], com diferenças mínimas no perfil da função, outras são mais complexas [e.g., envolvem a integração sobre a janela de η ou y], e o leitor deve consultar a coleção de referências citadas nesta seção a fim de avaliar as implicações físicas de cada uma delas.

Diante do bom acordo com os dados experimentais exibido na Fig. 6.7, podemos tentar buscar uma maneira de interpretar a Eq. (6.26) mantendo o espírito *no-hair* comentado acima. O número de partículas N vem da integração da seção de choque diferencial sobre a *rapidity* y e sobre o momento transversal p_T :

$$N = \int_{y^-}^{y^+} dy \int_0^\infty dp_T \frac{d^2 N}{dp_T dy} = \frac{2\pi}{c} \int_{y^-}^{y^+} dy \int_0^\infty dp_T p_T A(q, T, y) e_q^{-E_T/k_B T}$$

Assumindo uma janela de *rapidity* $\delta y = y^+ - y^-$ estreita em torno de $y \approx 0$ tal que a dependência em y de p_T possa ser desprezada e toda a dependência de y esteja incluída em $A(q, T, y)$, a equação anterior se escreve:

$$N = \int_0^\infty dp_T \frac{dN}{dp_T} \approx C \int_0^\infty dp_T p_T e_q^{-E_T/k_B T} \quad \text{com:} \quad C = \frac{2\pi}{c} \int_{y^-}^{y^+} A(q, T, y) dy \quad (6.28)$$

Essa aproximação seria exata caso fosse possível realizar medições precisamente com $y=0$. Notar

[¶]Sobre a associação entre S_q e fractais, do *abstract* de [9]: “*With the use of a quantity normally scaled in multifractals, a generalized form is postulated for entropy, namely (...)*” e segue a Eq. (6.2). Ver também [10], várias seções. Sobre a definição recursiva de *fireball*, da Pág. 1336 de [202]: “*A fireball is ► a statistical equilibrium of an undetermined number of all kinds of fireballs, each of which, in turn, is considered to be [voltar a ►]*”. O termo *fireball* surge na literatura representando quantidades mais ou menos relacionadas entre si. Por exemplo, em [241] *fireball* é a combinação dos nucleons mutuamente arrancados do núcleo alvo e do projétil na colisão de íons pesados. Em raios cósmicos [242], é visto como o produto intermediária da colisão, sendo algumas vezes batizado [e.g., mirim, açu; centauro, chiron — graças a Lattes]; neste contexto, o Prof. Chung, na Pág. 13 de seu livro [243], usa literalmente *bola-de-fogo*. Contudo, embora relacionado a esses outros, o *fireball* imaginado por Hagedorn é particular pelo conceito de autossimilaridade, propriedade que teve papel importante no subsequente desenvolvimento de seu modelo [204]. Aqui nesta seção estamos empregando rudimentos da teoria de Hagedorn. Autor que tem se dedicado a reconstruí-la, trocando, em seus fundamentos, Boltzmann-Gibbs por Tsallis, é A. Deppman [218, 219, 240, 244, 245], seguramente o maior especialista neste tema trabalhando no Brasil.

^{¶¶}Artigos elaborados em conjunto com uma dupla de especialistas em física de altas energias, C.-Y. Wong & G. Wilk [Wong é o autor de [210]]. Neles, em continuidade a estudos prévios da mesma dupla [214, 221], há uma discussão ambiciosa almejando derivar a Eq. (6.26) por princípios mais fundamentais apoiada em técnicas de cromodinâmica perturbativa (pQCD). Esta análise não será abordada aqui, remetemos o leitor a esses 5 artigos, especialmente os 2 na PRD [6, 214].

também que, pela Eq. (6.21), $y \approx 0$ significa ou que $E \approx E_T \approx cp_T \gg c|p_L|$, ou que os dados experimentais estão restritos a $|p_L| \approx 0$; a aproximação deve ser vista como resultado desta segunda alternativa[¶].

Agora, consideremos a densidade de estados de partícula única $\omega(\epsilon)$ de um sistema d -dimensional não interagente com espectro de energia relativístico:

$$\epsilon = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} \Rightarrow \omega(\epsilon) = \frac{\gamma V}{(2\pi\hbar c)^d} \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} [\epsilon^2 - m^2c^4]^{d/2-1} \epsilon$$

Representando por $f(\epsilon)$ a função distribuição do estado com energia ϵ e assumindo um único tipo de partícula de massa m , o número N pode ser expresso como uma integral sobre as energia permitidas:

$$N = \int \omega(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon \quad (6.29)$$

Mudando a descrição da energia ϵ para o momento p e considerando $d=2$, vem:

$$\omega(\epsilon) d\epsilon = \omega(p) dp \Rightarrow \omega(p) = \omega(\epsilon(p)) \frac{d\epsilon}{dp} = \frac{\gamma V}{(2\pi\hbar)^d} \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} p^{d-1} \stackrel{d=2}{=} \frac{2\pi\gamma V}{(2\pi\hbar)^2} p$$

O número de partículas então se escreve:

$$N = \int_0^\infty dp \omega(p) f(\epsilon(p)) = \frac{2\pi\gamma V}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^\infty dp p f(\epsilon(p)) \propto \int_0^\infty dp p f(\epsilon(p))$$

Identificando $p=p_T$ e $f(\epsilon) = f(E_T) = \exp_q[-E_T/k_B T]$ no resultado acima, essa abordagem simples, baseada em um sistema relativístico bidimensional, recupera o comportamento da Eq. (6.28). Esses passos são típicos do ensemble grande canônico tradicional aplicado a um gás ideal quântico^{¶¶}, e próximos dos seguidos por Beck em [198]. Generalizar o ensemble grande canônico é tarefa não trivial, sobretudo, vale lembrar, porque a q -exponencial não se fatora [*i.e.*, $e_q^{a+b} \neq e_q^a e_q^b$]. Beck contornou essa dificuldade postulando uma q -fatoração da probabilidade conjunta de um sistema de N partículas independentes [o que resultou na Eq. (15) da Ref. [198]]. Uma maneira conceitual de acomodar essa hipótese é pensar *à la* Kittel & Kromer [246], Cap. 6, e encarar o estado energético ϵ [orbital] como o sistema e os demais estados como parte do reservatório, que seria responsável por induzir no estado ϵ uma distribuição q -exponencial da forma $f(\epsilon) = \exp_q[-\epsilon/k_B T]$. A qualidade do ajuste oferecido pela Eq. (6.26) indica que este tratamento *no-hair* pode servir de alicerce sobre o qual modelos sofisticados podem ser construídos.

Os resultados desta seção reforçam a ideia pioneira de Bediaga, Curado & Miranda [197] e a

[¶]Acerca do efeito da largura da janela δy sobre a distribuição de massa transversa, $dN/dm_T m_T = dN/dp_T p_T$ para $c=1$, ver Sec. 8.1 de Letessier & Rafelski [207] e referências.

^{¶¶}Explicitamente, seguindo Salinas [14, Caps. 8 e 9], considerando apenas uma classe de partículas [bósons ou férmions], temos: definindo $x_k = \exp[-\beta(\epsilon_k - \mu)]$, a grande função de partição se escreve $\mathcal{Z} = \prod_k \sum_n x_k^n = \prod_k [1 \pm x_k]^{\pm 1}$ [+ férmions, - bósons]; a exponencial ser fatorável é essencial para alcançar este resultado. Continuando. Logaritmo: $\ln \mathcal{Z} = \pm \sum \ln[1 \pm x_k]$; ocupação média: $f_k = x_k \partial \ln \mathcal{Z} / \partial x_k = x_k / [1 \pm x_k]$, ou, restituindo ϵ_k , $f_k = f(\epsilon_k) = 1 / [\exp[\beta(\epsilon_k - \mu)] \pm 1]$, que é a distribuição de Fermi-Dirac ou Bose-Einstein. Finalmente, número de partículas: $N = \langle N \rangle = \sum f(\epsilon_k) = \int \omega(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon$, que é a Eq. (6.29) do texto. Notar também que, para $\mu=0$ e $\beta\epsilon \gg 1$, vem $f(\epsilon) \approx \exp[-\beta\epsilon]$, donde segue a Eq. (6.20), pois, em $d=3$, $\omega(p)dp = a4\pi p^2 dp = ad^3 p$ com $a = \gamma V / (2\pi\hbar)^3$ [$\Gamma(3/2) = \sqrt{\pi}/2$].

Tab. 6.2: Parâmetros dos ajustes com a Eq. (6.26) que produziram as curvas da Fig. 6.7. Os dados foram retirados dos artigos indicados e podem ser acessados de modo razoavelmente facilitado no *The Durham High Energy Physics Database* [URL: <http://hepdata.cedar.ac.uk>]. Os dados da colaboração ATLAS foram modificados de acordo com a transformação indicada na Eq. (6.27).

Detector	$c^2\sqrt{s}$ [TeV]	p_T [GeV/c]	A [GeV ⁻² c ³]	q	$k_B T$ [GeV]	Referência
ATLAS	0.9	$0.50 < p_T < 20.0$	32	1.125	0.126	[234] Fig. 7 (a)
ATLAS	7	$0.50 < p_T < 50.0$	43	1.151	0.129	[234] Fig. 7 (c)
CMS	0.9	$0.40 < p_T < 37.2$	30	1.127	0.126	[233] Fig. 5 (a)
CMS	7	$0.40 < p_T < 201.2$	38	1.150	0.132	[233] Fig. 5 (b)
ALICE	0.9	$0.15 < p_T < 10.0$	35	1.127	0.126	[232] Fig. 3 Direita

ATLAS = A Toroidal LHC Apparatus | **CMS** = Compact Muon Solenoid | **ALICE** = A Large Ion Collider Experiment

pertinência de uma conexão entre a cromodinâmica e a termoestatística não extensiva já sugerida por Walton & Rafelski [247]. O comportamento dos dados experimentais permite deduzir que o cenário de Hagedorn permanece fundamentalmente válido, com a exceção de que, a energias suficientemente altas, as partículas detectadas não são provenientes de uma região de equilíbrio ou quase equilíbrio térmico no sentido tradicional, mas possivelmente de algum tipo de estado estacionário associado à otimização da entropia S_q .

Capítulo 7

Comentários Finais

Ao lado da Mecânica Quântica, a Mecânica Estatística é uma teoria cujo desenvolvimento possivelmente nunca termine. A análise de seus fundamentos é tema recorrente em periódicos especializados, e mesmo questões concretas aparentemente estabelecidas, ressurgem, como mostra o recente debate de fôlego em torno da possibilidade de temperaturas negativas [248–252]. Debate baseado em . . . na própria definição da entropia S_{BG} , o mais fundamental conceito mecânico-estatístico e um dos mais sutis conceitos científicos. Isso se reflete até em aspectos mezinhos, como a letra que designa a energia de Helmholtz ou a função de partição: F e Z para Salinas [14], A e Q para Huang [70], para ficar em textos consagrados já citados. Provavelmente a Mecânica Estatística jamais receba o epíteto de *clássica*, não em antagonismo ao que é quântico, mas no sentido de ser fechada, completa, como talvez possa ser encarada a Mecânica de Newton e o Eletromagnetismo de Maxwell, teoria em que \mathbf{B} nem precisa ser explicitamente nomeado, por mais vaga que seja a relação entre símbolo e grandeza física a ele associada. Não há motivo, portanto, para esperar outro fim à teoria que almeja generalizar uma teoria em permanente construção, e esse é o papel da Mecânica Estatística Não Extensiva.

Quando lançar mão de uma termoestatística generalizada? Esta é uma pergunta importante e que, esperamos, o presente trabalho em alguma medida ajudou a responder. Não devemos, adaptando a imagem de Baranger [253], buscar aplicá-la em regimes ou sistemas sob o farol de Boltzmann-Gibbs, devemos olhar os locais escuros. Tomemos como exemplo-bússola o mapa logístico, um dos sistemas mais simples para o qual a mecânica estatística não extensiva tem se mostrado útil [10, 22–26]. Não vá à região regular, tampouco à caótica, olhe o ponto de Feigenbaum, associado ao limiar do caos. Analisamos aqui nesta tese, dinâmica e termodinamicamente, modelos de spins clássicos já considerados não termodinâmicos [44], e que, após uma modificação não física [35], tornaram-se fisicamente admissíveis. Em um desses modelos, q -gaussianas são observadas, uma das assinaturas da termoestatística construída sobre a entropia não aditiva S_q . A interação Newtoniana já representa um grande desafio à mecânica estatística. Buraco negro, sistema que explora o limite de nossa melhor teoria da gravidade e leva ao extremo o princípio da exclusão, é forte candidato a não ser encontrado debaixo do farol de Boltzmann-Gibbs. Aqui, foi discutida uma outra maneira de caracterizar a entropia de um buraco negro por meio de S_δ , conciliando-a com a extensividade exigida pela termodinâmica. Aplicação em cenários cosmológicos [193, 194], revela a pertinência desta alternativa. Em colisões relativísticas, no que concerne à distribuição de momento transversal, a história a baixas energias foi contada por Hagedorn. Experimentos a energias maiores entretanto,

evidenciam outra assinatura da termoestatística baseada em S_q : o comportamento q -exponencial.

Esses exemplos [mapa, sistema Hamiltoniano, buraco negro, alta energia] são de modo geral de grande interesse físico. Não devemos esperar que os locais escuros estejam relacionados apenas a sistemas *duros* assim. Ideias originárias da mecânica estatística não extensiva têm encontrado espaço em diversas outras áreas [10, 32, 33] que, estritamente, não pertencem à física [finanças, geofísica, medicina], mas que ainda assim são capazes de proporcionar *insights* sobre o significado do índice q igualmente relevantes. Estudá-las então com o formalismo da q -estatística acaba tendo importância para além da descrição adequada de um particular fenômeno. Afinal, a pequena Física da maçã caindo e a grande Física do planeta em órbita nem sempre tem conexão óbvia.

Apêndice A

Programas Utilizados

- ▶ Os programas para simular os sistemas α -XY [Cap. 4] e α -Heisenberg [Cap. 5] foram escritos em linguagem C e compilados no Linux com o gcc.
 - ▷ Códigos foram paralelizados com a versão 3 da interface de programação *The Open Multi-Processing* [The OpenMP API, URL: <http://openmp.org>].
 - ▷ Transformadas discretas de Fourier, essenciais para simular os sistemas quando $\alpha \neq 0$, foram realizadas com a versão 3 da biblioteca de sub-rotinas *Fastest Fourier Transform in the West* [FFTW3, URL: <http://www.fftw.org>].
- ▶ Todos os gráficos foram criados com o Gnuplot V.4.6. Ajustes contaram com a ajuda de rotinas internas do próprio Gnuplot.
- ▶ Cálculos analíticos algébricos e numéricos contaram com a ajuda do Maple V.13 ou posterior [*e.g.*, integrais na Sec. 4.7, solução autoconsistente das Eqs. (2.13) e (2.14)].

Referências Bibliográficas

- [1] C. Tsallis, L.J.L. Cirto, *Thermodynamics is More Powerful Than the Role to it Reserved by Boltzmann-Gibbs Statistical Mechanics*, *Eur. Phys. J. Spec. Top.* **223**, 2161–2175 (2014). 1, 84
- [2] C. Tsallis, L.J.L. Cirto, *Black Hole Thermodynamical Entropy*, *Eur. Phys. J. C* **73**, 2487 (2013). 1, 8, 84, 88, 89, 90, 94, 95
- [3] L.J.L. Cirto, V.R.V. Assis, C. Tsallis, *Influence of the Interaction Range on the Thermostatistics of a Classical Many-Body System*, *Physica A* **393**, 286–296 (2014). 1, 19, 22, 26, 28, 34, 47, 59
- [4] L.J.L. Cirto, L.S. Lima, F.D. Nobre, *Controlling the Range of Interactions in the Classical Inertial Ferromagnetic Heisenberg Model: Analysis of Metastable States*, *J. Stat. Mech.: Theor. Exper.* **4**, P04012 (2015). 1, 19, 22, 68, 70
- [5] L.A. Rios, R.M.O. Galvão, L.J.L. Cirto, *Comment on “Debye Shielding in a Nonextensive Plasma” [Phys. Plasmas **18**, 062102 (2011)]*, *Phys. Plasmas* **19**, 034701 (2012). 1, 41
- [6] C.-Y. Wong, G. Wilk, L.J.L. Cirto, C. Tsallis, *From QCD-Based Hard-Scattering to Nonextensive Statistical Mechanical Descriptions of Transverse Momentum Spectra in High-Energy pp and $p\bar{p}$ Collisions*, *Phys. Rev. D* **91**, 114027 (2015). 1, 84, 101
- [7] C.-Y. Wong, G. Wilk, L.J.L. Cirto, C. Tsallis, *Possible Implication of a Single Nonextensive p_T Distribution for Hadron Production in High-Energy pp Collisions*, *Eur. Phys. J. Web Conf.* **90**, 04002 (2015). 1, 84, 101
- [8] L.J.L. Cirto, C. Tsallis, C-Y. Wong, G. Wilk, *The Transverse-Momenta Distributions in High-Energy pp Collisions – A Statistical-Mechanical Approach*, [ArXiv:1409.3278 \[hep-ph\]](https://arxiv.org/abs/1409.3278) (2014). 1, 84, 101
- [9] C. Tsallis, *Possible Generalization of Boltzmann-Gibbs Statistics*, *J. Stat. Phys.* **52**, 479–487 (1988). 1, 3, 4, 44, 101, 108
- [10] C. Tsallis, *Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics: Approaching a Complex World* (Springer, Berlin, 2009). 1, 4, 5, 8, 18, 22, 28, 34, 35, 37, 55, 65, 85, 88, 98, 101, 104, 105
- [11] H.B. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics* (John Wiley & Sons, New York, 2 Ed., 1985). 1, 3
- [12] A.S. Eddington, *The Nature of the Physical World*, The Gifford Lectures 1927 (The Macmillan Company, New York, 1928). Da Pág. 74: “The law that entropy always increases—the second law of thermodynamics—holds, I think, the supreme position among the laws of Nature. If someone points out to you that your pet theory of the universe is in disagreement with Maxwell’s equations—then so much the worse for Maxwell’s equations. If it is found to be contradicted by observation—well, these experimentalists do bungle things sometimes. But if your theory is found to be against the second law of thermodynamics, I can give you no hope; there is nothing for it but to collapse in deepest humiliation.” 1
- [13] J.W. Gibbs, *Elementary Principles in Statistical Mechanics: Developed with Special Reference to the Rational Foundation of Thermodynamics* (Scribner’s sons, New York, 1902). Da Pág. 35: “In treating of the canonical distribution, we shall always suppose the multiple integral in equation (92) [a função de partição] to have a finite value, as otherwise the coefficient of probability vanishes, and the law of

distribution becomes illusory. This will exclude certain cases, but not such apparently, as will affect the value of our results with respect to their bearing on thermodynamics. It will exclude, for instance, cases in which the system or parts of it can be distributed in unlimited space (or in a space which has limits, but is still infinite in volume), while the energy remains beneath a finite limit. It also excludes many cases in which the energy can decrease without limit, as when the system contains material points which attract one another inversely as the squares of their distances.” 2, 24

- [14] S.R.A. Salinas, *Introdução à Física Estatística* (Editora da Universidade de São Paulo – EDUSP, São Paulo, 1997). Da Pág.123: “Recentemente, Constantino Tsallis, do centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, no Rio de Janeiro, inspirado nas equações para dimensões generalizadas dos objetos fractais, propôs a definição alternativa [ver Eq. (1.3), Pág. 3, desta tese] que se reduz à entropia de Boltzmann-Gibbs, dada pela equação (23) [Eq. (1.2), Pág. 2, desta tese] no limite $q \rightarrow 1$ [ver C. Tsallis, *J. Stat. Phys.* **52**, 479 (1988)] [Ref. [9] desta tese]. A entropia de Tsallis não é aditiva e não pode, portanto, ser aplicada a problemas de interesse termodinâmico. No entanto, é uma forma interessante, que dá origem a diversos desdobramentos e que talvez encontre aplicações em outros domínios da ciência.” 3, 102, 104
- [15] M. Gell-Mann, C. Tsallis, Eds., *Nonextensive Entropy: Interdisciplinary Applications* (Oxford University Press, Oxford, 2004). 3
- [16] Citado em: E.P. Borges, *Ponto de Vista: Homenagem a Constantino Tsallis em seu q-60º Aniversário*, *Folha da Física: Boletim Informativo do Instituto de Física da UFBA Ano II:08 (2003)*. D. Chillingworh & P.T. Landsberg:
“There was a young man from Brazil
Who made some of his colleagues feel ill.
He invented a ‘q’,
Which was something quite new,
And gave entropy researchers a thrill.” 5
- [17] H. Touchette, *The Large Deviation Approach to Statistical Mechanics*, *Phys. Rep.* **478**, 1–69 (2009). 5
- [18] G. Ruiz, C. Tsallis, *Towards a Large Deviation Theory for Strongly Correlated Systems*, *Phys. Lett. A* **376**, 2451–2454 (2012). 5
- [19] H. Touchette, *Comment on “Towards a Large Deviation Theory for Strongly Correlated Systems”*, *Phys. Lett. A* **377**, 436–438 (2013). 5
- [20] G. Ruiz, C. Tsallis, *Reply to Comment on “Towards a Large Deviation Theory for Strongly Correlated Systems”*, *Phys. Lett. A* **377**, 491–495 (2013). 5
- [21] M. Jauregui, 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). 5
- [22] U. Tirnakli, C. Tsallis, C. Beck, *Closer Look at Time Averages of the Logistic Map at the Edge of Chaos*, *Phys. Rev. E* **79**, 056209 (2009). 5, 35, 104
- [23] G. Ruiz, T. Bountis, C. Tsallis, *Time-Evolving Statistics of Chaotic Orbits of Conservative Maps in the Context of the Central Limit Theorem*, *Int. J. Bifurcat. Chaos* **22**, 1250208 (2012). 5, 35, 65, 104
- [24] O. Afsar, U. Tirnakli, *Generalized Huberman-Rudnick Scaling Law and Robustness of q-Gaussian Probability Distributions*, *Europhys. Lett.* **101**, 20003 (2013). 5, 35, 104
- [25] U. Tirnakli, E.P. Borges, *The Standard Map: From Boltzmann-Gibbs Statistics to Tsallis Statistics*, *Sci. Rep.* **6**, 23644 (2016). 5, 35, 104
- [26] U. Tirnakli, C. Tsallis, *Noisy Coupled Logistic Maps in the Vicinity of Chaos Threshold*, *Chaos* **26**, 043114 (2016). 5, 35, 104

- [27] C. Tsallis, S.M. Renio, A.R. Plastino, *The Role of Constraints within Generalized Nonextensive Statistics*, *Physica A* **261**, 534–554 (1998). 8, 44, 98
- [28] G.L. Ferri, S. Martínez, A. Plastino, *Equivalence of the Four Versions of Tsallis’s Statistics*, *J. Stat. Mech.: Theor. Exper.* **4**, P04009 (2005). 8, 98
- [29] J.S. Andrade, G.F.T. da Silva, A.A. Moreira, F.D. Nobre, E.M.F. Curado, *Thermostatistics of Overdamped Motion of Interacting Particles*, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 260601 (2010). 8, 42, 88
- [30] R. Silva Jr., A.R. Plastino, J.A.S. Lima, *A Maxwellian Path to the q -Nonextensive Velocity Distribution Function*, *Phys. Lett. A* **249**, 401–408 (1998). 8
- [31] R.S. Mendes, C. Tsallis, *Renormalization Group Approach to Nonextensive Statistical Mechanics*, *Phys. Lett. A* **285**, 273–278 (2001). 8
- [32] C. Tsallis, *An introduction to Nonadditive Entropies and a Thermostatistical Approach to Inanimate and Living Matter*, *Contemp. Phys.* **55**, 179–197 (2014). 8, 65, 105
- [33] C. Tsallis, *Inter-Occurrence Times and Universal Laws in Finance, Earthquakes and Genomes*, *Chaos Soliton. Fract.* **88**, 254–266 (2016). 8, 95, 105
- [34] H.E. Stanley, *Exact Solution for a Linear Chain of Isotropically Interacting Classical Spins of Arbitrary Dimensionality*, *Phys. Rev.* **179**, 570–577 (1969). 10, 11, 14, 28, 70
- [35] R.J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic Press, Massachusetts, 1982). Da Pág. 39: “This ‘mean-field’ Hamiltonian (3.1.3) [essencialmente a Eq. (2.3), Pág. 10, com termo de campo externo] is the one that will be considered in this chapter. As was remarked in Section 1.6, it is in a sense ‘infinite-dimensional’, since each spin interacts equally with every other. It also has the unphysical property that the interaction strength depends on the number of particles. Nevertheless, it does give moderately sensible thermodynamic properties.” Da Pág. 61: “While this is mathematically plausible, it is still true that the constraint (5.1.1) [i.e., $\sum S_i^2 = N$ com $S_i \in \mathbb{R}$, que define o modelo esférico] is unphysical in that it implies an equal coupling, or interaction, between all spins, no matter how far apart on \mathcal{L} [o reticulado] they may be. Fortunately Stanley (1968) [H.E. Stanley, *Phys. Rev.* **176**, 718–722 (1968), não citado nesta tese] has shown that the spherical model is a special limiting case of another model (the n -vector model) which has only nearest-neighbour interactions. This equivalence has since been proved rigorously by Kac and Thompson (1971) and Pearce and Thompson (1977) [M. Kac, C.J. Thompson, *Physica Norvegica* **5**, 163–168 (1971); P.A. Pearce, C.J. Thompson, *J. Stat. Phys.* **17**, 189–196 (1977), não citados nesta tese]. It effectively removes the above objection and establishes the spherical model as a physically acceptable model of critical behaviour.” Download gratuito com permissão do autor em https://physics.anu.edu.au/theophys/baxter_book.php. 11, 104
- [36] S.G. Brush, *How Ideas Became Knowledge: The Light-Quantum Hypothesis 1905–1935*, *Hist. Stud. Phys. Biol. Sci.* **37**, 205–246 (2007). 11
- [37] B. Andresen, *Comment on “Essential Discreteness in Generalized Thermostatistics with Non-Logarithmic Entropy” by Abe Sumiyoshi*, *Europhys. Lett.* **92**, 40005 (2010). 11
- [38] F.D. Nobre, C. Tsallis, *Classical Infinite-Range-Interaction Heisenberg Ferromagnetic Model: Metastability and Sensitivity to Initial Conditions*, *Phys. Rev. E* **68**, 036115 (2003). 14, 70, 71, 81, 83
- [39] A. Campa, A. Giansanti, D. Moroni, *Canonical Solution of Classical Magnetic Models with Long-Range Couplings*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **36**, 6897 (2003). 14, 18, 19, 24, 32, 70, 73, 82
- [40] S.G. Brush, *History of the Lenz-Ising Model*, *Rev. Mod. Phys.* **39**, 883–893 (1967). 16
- [41] E.H. Lieb, *The Stability of Matter*, *Rev. Mod. Phys.* **48**, 553–569 (1976). 17
- [42] T. Padmanabhan, *Statistical Mechanics of Gravitating Systems*, *Phys. Rep.* **188**, 285–362 (1990). 17

- [43] H.J. de Vega, N. Sánchez, *Statistical Mechanics of the Self-Gravitating Gas: I. Thermodynamic Limit and Phase Diagrams*, *Nucl. Phys. B* **625**, 409–459 (2002). 17, 23
- [44] B.J. Hiley, G.S. Joyce, *The Ising Model with Long-Range Interactions*, *Proc. Phys. Soc.* **85**, 493–507 (1965). Da Pág. 495: “Long-range potentials in d dimensions have an asymptotic behaviour of the type

$$|\phi(\mathbf{r})| \sim 1/r^{d+\delta} \quad (\text{as } r \rightarrow \infty). \quad (3)$$

It is convenient to divide potentials of this form into three categories specified by (a) $\delta < 0$, (b) $\delta > 0$, (c) $\delta = 0$. Let us consider the sums

$$\Phi_i(\sigma_j) = \sum_j \phi(\mathbf{r}_{ij}) \sigma_j. \quad (4)$$

With $\delta < 0$ this sum is divergent and, in consequence, the properties of a model using this type of potential will be non-thermodynamic. We will, therefore, not discuss these models further. In the case (b) the sums are absolutely convergent. In a large lattice the value of Φ_i for a very large number of i sites will be independent of \mathbf{r}_i and the shape of the boundary of the lattice. The thermodynamic properties per site would then be independent of the size and shape of the lattice. If, however, the potential is of type (c), the sums Φ_i may be conditionally convergent or, at worst, divergent. Here even in large lattices Φ_i will, in general, depend on the position \mathbf{r}_i and the shape of the specimen.” 17, 20, 104

- [45] P. Jund, S.G. Kim, C. Tsallis, *Crossover from Extensive to Nonextensive Behavior Driven by Long-Range Interactions*, *Phys. Rev. B* **52**, 50–53 (1995). 18, 19, 20, 25
- [46] S.A. Cannas, F.A. Tamarit, *Long-Range Interactions and Nonextensivity in Ferromagnetic Spin Models*, *Phys. Rev. B* **54**, R12661–R12664 (1996). 18, 24, 25
- [47] L.C. Sampaio, M.P. de Albuquerque, F.S. de Menezes, *Nonextensivity and Tsallis Statistics in Magnetic Systems*, *Phys. Rev. B* **55**, 5611–5614 (1997). 18, 25
- [48] J.R. Grigera, *Extensive and Non-Extensive Thermodynamics. A Molecular Dynamic Test*, *Phys. Lett. A* **217**, 47–51 (1996). 18
- [49] S. Curilef, C. Tsallis, *Critical Temperature and Nonextensivity in Long-Range Interacting Lennard–Jones-Like Fluids*, *Phys. Lett. A* **264**, 270–275 (1999). 18
- [50] C. Anteneodo, C. Tsallis, *Breakdown of Exponential Sensitivity to Initial Conditions: Role of the Range of Interactions*, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5313–5316 (1998). 18, 25, 28, 29, 33, 55, 64
- [51] F. Tamarit, C. Anteneodo, *Rotators with Long-Range Interactions: Connection with the Mean-Field Approximation*, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 208–211 (2000). 19
- [52] M. Antoni, S. Ruffo, *Clustering and Relaxation in Hamiltonian Long-Range Dynamics*, *Phys. Rev. E* **52**, 2361–2374 (1995). 19, 28
- [53] A. Campa, A. Giansanti, D. Moroni, *Canonical Solution of a System of Long-Range Interacting Rotators on a Lattice*, *Phys. Rev. E* **62**, 303–306 (2000). 19, 28
- [54] A. Giansanti, D. Moroni, A. Campa, *Universal Behaviour in the Static and Dynamic Properties of the α -XY Model*, *Chaos Soliton. Fract.* **13**, 407–416 (2002). 19, 55
- [55] E. Luijten, H.W.J. Blöte, *Boundary between Long-Range and Short-Range Critical Behavior in Systems with Algebraic Interactions*, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 025703 (2002). 20
- [56] F.D. Nobre, C. Tsallis, *Infinite-range Ising ferromagnet: Thermodynamic Limit within Generalized Statistical Mechanics*, *Physica A* **213**, 337–356 (1995). 20
- [57] C. Tsallis, *Nonextensive Thermodynamics and Fractals*, *Fractals* **03**, 541–547 (1995). 21, 25

- [58] S. Abe, A.K. Rajagopal, *Scaling Relations in Equilibrium Nonextensive Thermostatistics*, *Phys. Lett. A* **337**, 292–295 (2005). 22
- [59] Ch. Binek, S. Polisetty, Xi He, T. Mukherjee, R. Rajesh, J. Redepenning, *Nonextensivity in Magnetic Nanoparticle Ensembles*, *Phys. Rev. B* **74**, 054432 (2006). 22
- [60] M.E. Fisher, *The Free Energy of a Macroscopic System*, *Arch. Rational Mech. Anal.* **17**, 377–410 (1964). 24
- [61] G. Gallavotti, *Statistical Mechanics: A Short Treatise* (Springer, Berlin, 1999). 24
- [62] D. Ruelle, *Statistical Mechanics: Rigorous Results* (W.A. Benjamin, Massachusetts, 1969). 24, 25
- [63] R.B. Griffiths, *Rigorous Results and Theorems*. Em C. Domb, M.S. Green, Eds., *Exact Results*, Vol. **01** da *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Cap. 2, Págs. 7–109 (Academic Press, Massachusetts, 1972). 24, 25
- [64] R. Livi, M. Pettini, S. Ruffo, A. Vulpiani, *Chaotic Behavior in Nonlinear Hamiltonian Systems and Equilibrium Statistical Mechanics*, *J. Stat. Phys.* **48**, 539–559 (1987). 28
- [65] A. Campa, T. Dauxois, S. Ruffo, *Statistical Mechanics and Dynamics of Solvable Models with Long-Range Interactions*, *Phys. Rep.* **480**, 57–159 (2009). 28, 32, 33
- [66] A. Campa, P.-H. Chavanis, *Caloric Curves Fitted by Polytropic Distributions in the HMF Model*, *Eur. Phys. J. B* **86**, 170 (2013). 28, 33, 79
- [67] G.S. Joyce, *Classical Heisenberg Model*, *Phys. Rev.* **155**, 478–491 (1967). 28, 70
- [68] H. Yoshida, *Recent Progress in the Theory and Application of Symplectic Integrators*, *Celest. Mech. Dyn. Astron.* **56**, 27–43 (1993). 29
- [69] H. Yoshida, *Construction of Higher Order Symplectic Integrators*, *Phys. Lett. A* **150**, 262–268 (1990). 29
- [70] K. Huang, *Statistical Mechanics* (John Wiley & Sons, New York, 2 Ed., 1987). 30, 104
- [71] M.P. Allen, D.J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Clarendon Press, Oxford, 1987). 30, 71
- [72] K. Binder, D. Stauffer, *A Simple Introduction to Monte Carlo Simulation and Some Specialized Topics*. Em K. Binder, Ed., *Applications of the Monte Carlo Method in Statistical Physics*, Vol. **36** da *Topics in Current Physics*, Cap. 1, Págs. 1–36 (Springer, Berlin, 1984). 30
- [73] X. Leoncini, A.D. Verga, S. Ruffo, *Hamiltonian Dynamics and the Phase Transition of the XY Model*, *Phys. Rev. E* **57**, 6377–6389 (1998). 30
- [74] A. Pluchino, V. Latora, A. Rapisarda, *Glassy Phase in the Hamiltonian Mean-Field Model*, *Phys. Rev. E* **69**, 056113 (2004). 30
- [75] A. Pluchino, V. Latora, A. Rapisarda, *Effective Spin-Glass Hamiltonian for the Anomalous Dynamics of the HMF Model*, *Physica A* **370**, 573–584 (2006). 30, 33, 79
- [76] M. Antoni, H. Hinrichsen, S. Ruffo, *On the Microcanonical Solution of a System of Fully Coupled Particles*, *Chaos Soliton. Fract.* **13**, 393–399 (2002). 32
- [77] J. Barré, F. Bouchet, T. Dauxois, S. Ruffo, *Large Deviation Techniques Applied to Systems with Long-Range Interactions*, *J. Stat. Phys.* **119**, 677–713 (2005). 32
- [78] D. Lynden-Bell, *Negative Specific Heat in Astronomy, Physics and Chemistry*, *Physica A* **263**, 293–304 (1999). 33
- [79] F. Staniscia, A. Turchi, D. Fanelli, P.-H. Chavanis, G. De Ninno, *Negative Specific Heat in the Canonical Statistical Ensemble*, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 010601 (2010). 33

- [80] V. Latora, A. Rapisarda, S. Ruffo, *Chaos and Statistical Mechanics in the Hamiltonian Mean Field Model*, *Physica D* **131**, 38–54 (1999). 33, 54, 62
- [81] V. Latora, A. Rapisarda, C. Tsallis, *Non-Gaussian Equilibrium in a Long-Range Hamiltonian System*, *Phys. Rev. E* **64**, 056134 (2001). 33
- [82] Y.Y. Yamaguchi, J. Barré, F. Bouchet, T. Dauxois, S. Ruffo, *Stability Criteria of the Vlasov Equation and Quasi-Stationary States of the HMF Model*, *Physica A* **337**, 36–66 (2004). 33, 82
- [83] A. Campa, A. Giansanti, G. Morelli, *Long-Time Behavior of Quasistationary States of the Hamiltonian Mean-Field Model*, *Phys. Rev. E* **76**, 041117 (2007). 33, 82
- [84] T.M. Rocha Filho, A.E. Santana, M.A. Amato, A. Figueiredo, *Scaling of the Dynamics of Homogeneous States of One-Dimensional Long-Range Interacting Systems*, *Phys. Rev. E* **90**, 032133 (2014). 33
- [85] T.M. Rocha Filho, M.A. Amato, A.E. Santana, A. Figueiredo, J.R. Steiner, *Dynamics and Physical Interpretation of Quasistationary States in Systems with Long-Range Interactions*, *Phys. Rev. E* **89**, 032116 (2014). 33
- [86] P.-H. Chavanis, A. Campa, *Inhomogeneous Tsallis Distributions in the HMF Model*, *Eur. Phys. J. B* **76**, 581–611 (2010). 33, 79
- [87] W. Ettoumi, M.-C. Firpo, *Action Diffusion and Lifetimes of Quasistationary States in the Hamiltonian Mean-Field Model*, *Phys. Rev. E* **87**, 030102 (2013). 33, 82
- [88] Y. Levin, R. Pakter, F.B. Rizzato, T.N. Teles, F.P.C. Benetti, *Nonequilibrium Statistical Mechanics of Systems with Long-Range Interactions*, *Phys. Rep.* **535**, 1–60 (2014). 33
- [89] V. Latora, A. Rapisarda, C. Tsallis, *Fingerprints of Nonextensive Thermodynamics in a Long-Range Hamiltonian System*, *Physica A* **305**, 129–136 (2002). 33
- [90] V. Latora, A. Rapisarda, *Dynamical Quasi-Stationary States in a System with Long-Range Forces*, *Chaos Soliton. Fract.* **13**, 401–406 (2002). 33
- [91] A. Pluchino, A. Rapisarda, C. Tsallis, *Nonergodicity and Central-Limit Behavior for Long-Range Hamiltonians*, *Europhys. Lett.* **80**, 26002 (2007). 34, 38
- [92] A. Pluchino, A. Rapisarda, C. Tsallis, *A Closer Look at the Indications of q -Generalized Central Limit Theorem Behavior in Quasi-Stationary States of the HMF Model*, *Physica A* **387**, 3121–3128 (2008). 34, 35, 38
- [93] A. Pluchino, *Metastability, Nonextensivity and Glassy Dynamics in a Class of Long-Range Hamiltonian Models*, Tese de PhD, Università degli Studi di Catania (2005). 34
- [94] A. Figueiredo, T.M. Rocha Filho, M.A. Amato, *Ergodicity and Central-Limit Theorem in Systems with Long-Range Interactions*, *Europhys. Lett.* **83**, 30011 (2008). 34, 38
- [95] A. Pluchino, A. Rapisarda, C. Tsallis, *Comment on “Ergodicity and Central-Limit Theorem in Systems with Long-Range Interactions” by A. Figueiredo et al.*, *Europhys. Lett.* **85**, 60006 (2009). 34, 38
- [96] A. Figueiredo, T.M. Rocha Filho, M.A. Amato, *Reply to the Comment by A. Pluchino et al.*, *Europhys. Lett.* **85**, 60007 (2009). 34
- [97] H. Christodoulidi, C. Tsallis, T. Bountis, *Fermi-Pasta-Ulam Model with Long-Range Interactions: Dynamics and Thermostatistics*, *Europhys. Lett.* **108**, 40006 (2014). 35, 47
- [98] A. Rodríguez, C. Tsallis, *A Dimension Scale-Invariant Probabilistic Model Based on Leibniz-Like Pyramids*, *J. Math. Phys.* **53**, 023302 (2012). 35

- [99] J. Ruseckas, *Probabilistic Model of N Correlated Binary Random Variables and Non-Extensive Statistical Mechanics*, *Phys. Lett. A* **379**, 654–659 (2015). 35, 87
- [100] G. Sicuro, P. Tempesta, A. Rodríguez, C. Tsallis, *On the Robustness of the q -Gaussian Family*, *Ann. Phys.* **363**, 316–336 (2015). 35
- [101] R. Rak, S. Drożdż, J. Kwapien, P. Oświęcimka, *Stock Returns Versus Trading Volume: Is the Correspondence More General?*, *Acta Phys. Pol. B* **44**, 2035–2050 (2013). 35
- [102] J. Ludescher, A. Bunde, *Universal Behavior of the Interoccurrence Times Between Losses in Financial Markets: Independence of the Time Resolution*, *Phys. Rev. E* **90**, 062809 (2014). 35
- [103] U. Tirnakli, H.J. Jensen, C. Tsallis, *Restricted Random Walk Model as a New Testing Ground for the Applicability of q -Statistics*, *Europhys. Lett.* **96**, 40008 (2011). 35
- [104] J. Zand, U. Tirnakli, H.J. Jensen, *On the Relevance of q -distribution Functions: The Return Time Distribution of Restricted Random Walker*, *J. Phys. A: Math. Theor.* **48**, 425004 (2015). 35
- [105] W. Feller, *An Introduction to Probability Theory and Its Applications, Vol. 2* (John Wiley & Sons, New York, 2 Ed., 1971). 36
- [106] V.V. Uchaikin, V.M. Zolotarev, *Chance and Stability: Stable Distributions and Their Applications* (De Gruyter, Berlin, 1999). 36
- [107] J.-P. Bouchaud, M. Potters, *Theory of Financial Risk and Derivative Pricing: From Statistical Physics to Risk Management* (Cambridge University Press, Cambridge, 2 Ed., 2003). 36
- [108] M. Jauregui, C. Tsallis, *New Representations of π and Dirac Delta Using the Nonextensive-Statistical-Mechanics q -Exponential Function*, *J. Math. Phys.* **51**, 063304 (2010). 37
- [109] M. Jauregui, C. Tsallis, E.M.F. Curado, *q -Moments Remove the Degeneracy Associated with the Inversion of the q -Fourier Transform*, *J. Stat. Mech.: Theor. Exper.* **10**, P10016 (2011). 37
- [110] M. Jauregui, C. Tsallis, *q -Generalization of the Inverse Fourier Transform*, *Phys. Lett. A* **375**, 2085–2088 (2011). 37
- [111] M. Matsumoto, T. Nishimura, *Mersenne Twister: A 623-Dimensionally Equidistributed Uniform Pseudo-Random Number Generator*, *ACM Trans. Model. Comput. Simul.* **8**, 3–30 (1998). 37
- [112] C. Tsallis, *Nonextensive Statistical Mechanics, Anomalous Diffusion and Central Limit Theorems*, *Milan J. Math.* **73**, 145–176 (2005). Da Pág. 157: “It should be transparently clear at this point that we have no definitive arguments for proving this conjectural theorem. Various converging paths are nevertheless available that might inspire a (professional or amateur) mathematician the way to prove it. Galileo used to say that knowing a result is not neglectable in order to prove it! It is our best hope that his saying does apply in the present case! So, what are these converging paths? Although naturally intertwined, let us expose them along six different lines.” 37
- [113] S. Umarov, C. Tsallis, M. Gell-Mann, S. Steinberg, *Generalization of Symmetric α -Stable Lévy Distributions for $q > 1$* , *J. Math. Phys.* **51**, 033502 (2010). 37
- [114] S. Umarov, C. Tsallis, S. Steinberg, *On a q -Central Limit Theorem Consistent with Nonextensive Statistical Mechanics*, *Milan J. Math.* **76**, 307–328 (2008). 37
- [115] H.J. Hilhorst, *Note on a q -Modified Central Limit Theorem*, *J. Stat. Mech.: Theor. Exper.* **10**, P10023 (2010). 37
- [116] A. Plastino, M.C. Rocca, *q -Fourier Transform and its Inversion-Problem*, *Milan J. Math.* **80**, 243–249 (2012). 37
- [117] A. Plastino, M.C. Rocca, *Inversion of Umarov-Tsallis-Steinberg’s q -Fourier Transform and the Complex-Plane Generalization*, *Physica A* **391**, 4740–4747 (2012). 37

- [118] C. Vignat, A. Plastino, *Central Limit Theorem and Deformed Exponentials*, *J. Phys. A: Math. Theor.* **40**, F969 (2007). 37
- [119] C. Vignat, A. Plastino, *Geometry of the Central Limit Theorem in the Nonextensive Case*, *Phys. Lett. A* **373**, 1713–1718 (2009). 37
- [120] M.G. Hahn, X. Jiang, S. Umarov, *On q -Gaussians and Exchangeability*, *J. Phys. A: Math. Theor.* **43**, 165208 (2010). 37
- [121] A. Turchi, D. Fanelli, X. Leoncini, *Existence of Quasi-Stationary States at the Long Range Threshold*, *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* **16**, 4718–4724 (2011). 41
- [122] W. Niedenzu, T. Griebner, H. Ritsch, *Kinetic Theory of Cavity Cooling and Self-Organisation of a Cold Gas*, *Europhys. Lett.* **96**, 43001 (2011). 41
- [123] F.D. Nobre, E.M.F. Curado, A.M.C. Souza, R.F.S. Andrade, *Consistent Thermodynamic Framework for Interacting Particles by Neglecting Thermal Noise*, *Phys. Rev. E* **91**, 022135 (2015). 42, 88
- [124] T.S. Biró, *Is There a Temperature? Conceptual Challenges at High Energy, Acceleration and Complexity* (Springer, Berlin, 2011). 42
- [125] F. Bardou, J-P. Bouchaud, A. Aspect, C. Cohen-Tannoudji, *Lévy Statistics and Laser Cooling: How Rare Events Bring Atoms to Rest* (Cambridge University Press, Cambridge, 2002). 42
- [126] A.M. Teweldeberhan, A.R. Plastino, H.G. Miller, *On the Cut-Off Prescriptions Associated with Power-Law Generalized Thermostatistics*, *Phys. Lett. A* **343**, 71–78 (2005). 43
- [127] C. Beck, F. Schlögl, *Thermodynamics of Chaotic Systems: An Introduction* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995). 44
- [128] C. Beck, E.G.D. Cohen, *Superstatistics*, *Physica A* **322**, 267–275 (2003). 44
- [129] C. Tsallis, A.R. Plastino, R.F. Alvarez-Estrada, *Escort Mean Values and the Characterization of Power-Law-Decaying Probability Densities*, *J. Math. Phys.* **50**, 043303 (2009). 46
- [130] M-C. Firpo, *Analytic Estimation of the Lyapunov Exponent in a Mean-Field Model Undergoing a Phase Transition*, *Phys. Rev. E* **57**, 6599–6603 (1998). 54, 55
- [131] L. Casetti, C. Clementi, M. Pettini, *Riemannian Theory of Hamiltonian Chaos and Lyapunov Exponents*, *Phys. Rev. E* **54**, 5969–5984 (1996). 54
- [132] L. Caiani, L. Casetti, C. Clementi, M. Pettini, *Geometry of Dynamics, Lyapunov Exponents, and Phase Transitions*, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4361–4364 (1997). 54
- [133] L. Casetti, M. Pettini, E.G.D. Cohen, *Geometric Approach to Hamiltonian Dynamics and Statistical Mechanics*, *Phys. Rep.* **337**, 237–341 (2000). 54
- [134] Y.Y. Yamaguchi, *Slow Relaxation at Critical Point of Second Order Phase Transition in a Highly Chaotic Hamiltonian System*, *Prog. Theor. Phys.* **95**, 717–731 (1996). 54
- [135] M-C. Firpo, S. Ruffo, *Chaos Suppression in the Large Size Limit for Long-Range Systems*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **34**, L511 (2001). 55
- [136] D. Bagchi, C. Tsallis, *Sensitivity to Initial Conditions of a d -Dimensional Long-Range-Interacting Quartic Fermi-Pasta-Ulam Model: Universal Scaling*, *Phys. Rev. E* **93**, 062213 (2016). 55
- [137] A. Campa, A. Giansanti, D. Moroni, C. Tsallis, *Classical Spin Systems with Long-Range Interactions: Universal Reduction of Mixing*, *Phys. Lett. A* **286**, 251–256 (2001). 55
- [138] M.A. Montemurro, F.A. Tamarit, C. Anteneodo, *Aging in an Infinite-Range Hamiltonian System of Coupled Rotators*, *Phys. Rev. E* **67**, 031106 (2003). 56

- [139] A. Pluchino, V. Latora, A. Rapisarda, *Metastable States, Anomalous Distributions and Correlations in the HMF Model*, *Physica D* **193**, 315–328 (2004). 56
- [140] R. Bachelard, T. Dauxois, G. De Ninno, S. Ruffo, F. Staniscia, *Vlasov Equation for Long-Range Interactions on a Lattice*, *Phys. Rev. E* **83**, 061132 (2011). 62
- [141] S. Gupta, A. Campa, S. Ruffo, *Overdamped Dynamics of Long-Range Systems on a One-Dimensional Lattice: Dominance of the Mean-Field Mode and Phase Transition*, *Phys. Rev. E* **86**, 061130 (2012). 62
- [142] L.G. Moyano, C. Anteneodo, *Diffusive Anomalies in a Long-Range Hamiltonian System*, *Phys. Rev. E* **74**, 021118 (2006). 63
- [143] F. Baldovin, E. Brigatti, C. Tsallis, *Quasi-Stationary States in Low-Dimensional Hamiltonian Systems*, *Phys. Lett. A* **320**, 254–260 (2004). 65
- [144] H. Hasegawa, *Specific Heat and Entropy of N-Body Nonextensive Systems*, *Phys. Rev. E* **82**, 031138 (2010). 65
- [145] A. Cho, *A Fresh Take on Disorder, Or Disorderly Science? (News Focus)*, *Science* **297**, 1268–1269 (2002). 65
- [146] *Letters on the EPN 36/6 Special Issue (news and views)*, *Europhys. News* **37:02**, 9–11 (2006). 65
- [147] T. Dauxois, *Non-Gaussian Distributions Under Scrutiny*, *J. Stat. Mech.: Theor. Exper.* **8**, N08001 (2007). 65
- [148] C. Tsallis, *T. Dauxois’ “Non-Gaussian Distributions Under Scrutiny” Under Scrutiny*. Em H.J. Haubold, A.M. Mathai, Eds., *Proceedings of the Third UN/ESA/NASA Workshop on the International Heliophysical Year 2007 and Basic Space Science: National Astronomical Observatory of Japan*, Vol. **19** da *Astrophysics and Space Science Proceedings*, Cap. 1, Págs. 1–9 (Springer, Berlin, 2010). 65
- [149] J. Cartwright, *Roll Over, Boltzmann*, *Phys. World* **27:05**, 31–35 (2014). 65
- [150] S.W. McCuskey, *Introduction to Celestial Mechanics* (Addison-Wesley, Massachusetts, 1963). 65
- [151] F. Caruso, C. Tsallis, *Nonadditive Entropy Reconciles the Area Law in Quantum Systems with Classical Thermodynamics*, *Phys. Rev. E* **78**, 021102 (2008). 66, 67
- [152] L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh, V. Vedral, *Entanglement in Many-Body Systems*, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 517–576 (2008). 66
- [153] J. Eisert, M. Cramer, M.B. Plenio, *Colloquium: Area Laws for the Entanglement Entropy*, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 277–306 (2010). Do Abstract: “Physical interactions in quantum many-body systems are typically local: Individual constituents interact mainly with their few nearest neighbors. This locality of interactions is inherited by a decay of correlation functions, but also reflected by scaling laws of a quite profound quantity: the entanglement entropy of ground states. This entropy of the reduced state of a subregion often merely grows like the boundary area of the subregion, and not like its volume, in sharp contrast with an expected extensive behavior. Such “area laws” for the entanglement entropy and related quantities have received considerable attention in recent years. They emerge in several seemingly unrelated fields, in the context of black hole physics, quantum information science, and quantum many-body physics where they have important implications on the numerical simulation of lattice models.” 66, 94
- [154] A. Saguia, M.S. Sarandy, *Nonadditive Entropy for Random Quantum Spin-S Chains*, *Phys. Lett. A* **374**, 3384–3388 (2010). 67
- [155] J. Cardy, *The Ubiquitous ‘c’: From the Stefan-Boltzmann Law to Quantum Information*, *J. Stat. Mech.: Theor. Exper.* **10**, P10004 (2010). 67

- [156] F.D. Nobre, C. Tsallis, *Metastable States of the Classical Inertial Infinite-Range-Interaction Heisenberg Ferromagnet: Role of Initial Conditions*, *Physica A* **344**, 587–594 (2004). 70, 71, 81
- [157] S. Gupta, D. Mukamel, *Quasistationarity in a Model of Long-Range Interacting Particles Moving on a Sphere*, *Phys. Rev. E* **88**, 052137 (2013). 70, 71, 81, 82, 83
- [158] D.C. Rapaport, D.P. Landau, *Critical Dynamics of a Dynamical Version of the Classical Heisenberg Model*, *Phys. Rev. E* **53**, 4696–4702 (1996). 70, 71
- [159] M.E. Fisher, *Magnetism in One-Dimensional Systems—The Heisenberg Model for Infinite Spin*, *Am. J. Phys.* **32**, 343–346 (1964). 70
- [160] T. Nakamura, *Statistical Theory of Hindered Rotation in Molecular Crystals*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **7**, 264–269 (1952). 70
- [161] D.T. Robb, L.E. Reichl, E. Faraggi, *Simulation of Hysteresis in Magnetic Nanoparticles with Nosé Thermostatting*, *Phys. Rev. E* **67**, 056130 (2003). 71
- [162] J. Barojas, D. Levesque, B. Quentrec, *Simulation of Diatomic Homonuclear Liquids*, *Phys. Rev. A* **7**, 1092–1105 (1973). 71
- [163] D.J. Evans, *On the Representatation of Orientation Space*, *Mol. Phys.* **34**, 317–325 (1977). 71
- [164] D.J. Evans, S. Murad, *Singularity Free Algorithm for Molecular Dynamics Simulation of Rigid Polyato*, *Mol. Phys.* **34**, 327–331 (1977). 71
- [165] R. Bachelard, M. Kastner, *Universal Threshold for the Dynamical Behavior of Lattice Systems with Long-Range Interactions*, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 170603 (2013). 82
- [166] O. Penrose, *Foundations of Statistical Mechanics: A Deductive Treatment*, Vol. **22** da *International Series in Natural Philosophy* (Pergamon Press, Oxford, 1970). 84
- [167] E.P. Borges, *A possible Deformed Algebra and Calculus Inspired in Nonextensive Thermostatistics*, *Physica A* **340**, 95–101 (2004). 85
- [168] C. Tsallis, M. Gell-Mann, Y. Sato, *Asymptotically Scale-Invariant Occupancy of Phase Space Makes the Entropy S_q Extensive*, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **102**, 15377–15382 (2005). 87
- [169] M.R. Ubriaco, *Entropies Based on Fractional Calculus*, *Phys. Lett. A* **373**, 2516–2519 (2009). 88
- [170] M.S. Ribeiro, C. Tsallis, F.D. Nobre, *Probability Distributions Extremizing the Nonadditive Entropy S_δ and Stationary States of the Corresponding Nonlinear Fokker-Planck Equation*, *Phys. Rev. E* **88**, 052107 (2013). 88
- [171] M.S. Ribeiro, F.D. Nobre, C. Tsallis, *Probability Distributions and Associated Nonlinear Fokker-Planck Equation for the Two-Index Entropic form $S_{q,\delta}$* , *Phys. Rev. E* **89**, 052135 (2014). 88
- [172] P. Tempesta, *Beyond the Shannon-Khinchin Formulation: The Composability Axiom and the Universal-Group Entropy*, *Ann. Phys.* **365**, 180–197 (2016). 88
- [173] R. Hanel, S. Thurner, *A comprehensive Classification of Complex Statistical Systems and an Axiomatic Derivation of Their Entropy and Distribution Functions*, *Europhys. Lett.* **93**, 20006 (2011). 89
- [174] R. Hanel, S. Thurner, *When do Generalized Entropies Apply? How Phase Space Volume Determines Entropy*, *Europhys. Lett.* **96**, 50003 (2011). 89
- [175] S. Boyd, L. Vandenberghe, *Convex Optimization* (Cambridge University Press, Cambridge, 2004). Download gratuito com permissão dos autores em <http://stanford.edu/~boyd/cvxbook>. 93
- [176] S.W. Hawking, *Information Preservation and Weather Forecasting for Black Holes*, *ArXiv:1401.5761 [hep-th]* (2014). 93

- [177] Z. Merali, *Stephen Hawking: “There Are no Black Holes”*, [Nature News](#) 24 January (2014). 93
- [178] J.D. Bekenstein, *Black Holes and Entropy*, [Phys. Rev. D](#) **7**, 2333–2346 (1973). 93, 117
- [179] S.W. Hawking, *Black Holes and Thermodynamics*, [Phys. Rev. D](#) **13**, 191–197 (1976). 93, 95
- [180] J.D. Bekenstein, *Black Holes and Information Theory*, [Contemp. Phys.](#) **45**, 31–43 (2004). 93
- [181] B.P. Dolan, *The Cosmological Constant and Black-Hole Thermodynamic Potentials*, [Class. Quantum Grav.](#) **28**, 125020 (2011). 93
- [182] M. Cvetič, G.W. Gibbons, D. Kubizňák, C.N. Pope, *Black Hole Enthalpy and an Entropy Inequality for the Thermodynamic Volume*, [Phys. Rev. D](#) **84**, 024037 (2011). 93
- [183] R.A. Hennigar, R.B. Mann, D. Kubizňák, *Entropy Inequality Violations from Ultraspinning Black Holes*, [Phys. Rev. Lett.](#) **115**, 031101 (2015). 93
- [184] M. Christodoulou, C. Rovelli, *How Big is a Black Hole ?*, [Phys. Rev. D](#) **91**, 064046 (2015). 93
- [185] S. Carlip, *Black Hole Thermodynamics and Statistical Mechanics*. Em E. Papantonopoulos, Ed., *Physics of Black Holes: A Guided Tour*, Vol. **769** da *Lecture Notes in Physics*, Cap. 3, Págs. 89–123 (Springer, Berlin, 2009). Da Pág. 116: “As a count of microscopic degrees of freedom, the Bekenstein-Hawking entropy (3.2) [Eq. (6.17), Pág. 94, desta tese] has a peculiar feature: the number of degrees of freedom is determined by the area of a surface rather than the volume it encloses. This is very different from conventional thermodynamics, in which entropy is an extensive quantity, and it implies that the number of degrees of freedom grows much more slowly with size than one would expect in an ordinary thermodynamic system.” 93, 94
- [186] S.N. Solodukhin, *Entanglement Entropy of Black Holes*, [Living Rev. Relativity](#) **14:08** (2011). 93
- [187] S. Kolekar, T. Padmanabhan, *Ideal Gas in a Atrong Gravitational Field: Area Dependence of Entropy*, [Phys. Rev. D](#) **83**, 064034 (2011). Da Pág. 1: “Work in the last several decades attempted to understand the physical origin of the thermodynamical variables attributed to the horizons concentrating mostly on black hole horizons. In spite of extensive work and different possible suggestions for the source of, for example, entropy, it is probably fair to say that we still do not quite understand the physics behind this phenomenon.” 94
- [188] S. Das, S. Shankaranarayanan, *How Robust is the Entanglement Entropy-Area Relation ?*, [Phys. Rev. D](#) **73**, 121701 (2006). Da Pág. 1: “Although classical black holes (BHs) have infinite entropy and zero temperature, Bekenstein—inspired by the area increase theorem of general relativity—proposed that BHs have entropy proportional to the horizon area A_H . This, together with Hawking’s discovery that BHs radiate with the temperature $T_H = \hbar c^3 / (8\pi GM)$, has given rise to the Bekenstein-Hawking area law for BH entropy: [ver Eq. (6.17), Pág. 94, desta tese]. The area (as opposed to volume) proportionality of BH entropy has been an intriguing issue for decades.” 94
- [189] R. Brustein, M.B. Einhorn, A. Yarom, *Entanglement Interpretation of Black Hole Entropy in String Theory*, [J. High Energy Phys.](#) **01**, 098 (2006). Da Pág. 1: “The discovery that black holes have entropy [1] and that they radiate [2], has led to many speculations about their quantum gravity origin. The unusual non-extensive nature of the entropy of black holes and their effect on matter thrown into them, leads to conjectures that entropy bounds should exist [3].” [[1]= Ref. [178] desta tese. [2,3] = S.W. Hawking, [Commun. Math. Phys.](#) **43**, 199 (1975), J.D. Bekenstein, [Phys. Rev. D](#) **23**, 287 (1981), trabalhos não citados nesta tese] 94
- [190] J. Oppenheim, *Area Scaling Entropies for Gravitating Systems*, [Phys. Rev. D](#) **65**, 024020 (2001). Da Pág. 1: “The entropy of ordinary matter is usually proportional to its volume and depends crucially on its composition. The entropy of a black hole [1,2] is therefore very mysterious, in part because it is proportional to the black hole’s area A .” [[1,2] = J. Bekenstein, [Lett. Nuovo Cimento](#) **4**, 737 (1972), S.W. Hawking, [Commun. Math. Phys.](#) **43**, 199 (1975), trabalhos não citados nesta tese] 94
- [191] S. Carlip, *Quantum Gravity in 2+1 Dimensions* (Cambridge University Press, Cambridge, 1998). 95

- [192] P.T. Landsberg, D. Tranah, *Entropies Need Not to Be Concave*, *Phys. Lett. A* **78**, 219–220 (1980). 95
- [193] N. Komatsu, S. Kimura, *Entropic Cosmology for a Generalized Black-Hole Entropy*, *Phys. Rev. D* **88**, 083534 (2013). 95, 104
- [194] N. Komatsu, S. Kimura, *General Form of Entropy on the Horizon of the Universe in Entropic Cosmology*, *Phys. Rev. D* **93**, 043530 (2016). 95, 104
- [195] G. Kaniadakis, A. Lavagno, P. Quarati, *Generalized Statistics and Solar Neutrinos*, *Phys. Lett. B* **369**, 308–312 (1996). 96
- [196] D.B. Ion, M.L.D. Ion, *Entropic Lower Bound for the Quantum Scattering of Spinless Particles*, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5714–5717 (1998). 96
- [197] I. Bediaga, E.M.F. Curado, J.M. de Miranda, *A Nonextensive Thermodynamical Equilibrium Approach in $e^+e^- \rightarrow$ Hadrons*, *Physica A* **286**, 156–163 (2000). 96, 98, 102
- [198] C. Beck, *Non-extensive Statistical Mechanics and Particle Spectra in Elementary Interactions*, *Physica A* **286**, 164–180 (2000). 96, 97, 98, 100, 102
- [199] W.M. Alberico, A. Lavagno, P. Quarati, *Non-Extensive Statistics, Fluctuations and Correlations in High-Energy Nuclear Collisions*, *Eur. Phys. J. C* **12**, 499–506 (2000). 96
- [200] G. Wilk, Z. Włodarczyk, *Interpretation of the Nonextensivity Parameter q in Some Applications of Tsallis Statistics and Lévy Distributions*, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2770–2773 (2000). 96
- [201] R. Hagedorn, *Statistical Thermodynamics of Strong Interactions at High Energies*, Technical Report No. CERN-TH-520, CERN (1965). 96
- [202] R. Hagedorn, *On the Hadronic Mass Spectrum*, *Nuovo Cimento A* **52**, 1336–1340 (1967). 96, 101
- [203] R. Hagedorn, *Multiplicities, p_T Distributions and the Expected Hadron \rightarrow Quark-Gluon Phase Transition*, *Riv. Nuovo Cimento* **06:10**, 1–50 (1983). 96, 97
- [204] R. Hagedorn, *The Long Way to the Statistical Bootstrap Model*. Em J. Letessier, H.H. Gutbrod, J. Rafelski, Eds., *Hot Hadronic Matter: Theory and Experiment*, Vol. **346** da *NATO ASI Series*, Cap. 1, Sec. 2, Págs. 13–46 (Springer, Berlin, 1995). 96, 101
- [205] J. Rafelski, T. Ericson, *The Tale of the Hagedorn Temperature*, *CERN Courier* **43:07**, 30–34 September (2003). 96
- [206] K.A. Olive *et al.* (Particle Data Group), *Review of Particle Physics*, *Chin. Phys. C* **38**, 090001 (2014). 96, 98
- [207] J. Letessier, J. Rafelski, *Hadrons and Quark-Gluon Plasma* (Cambridge University Press, Cambridge, 2002). 96, 102
- [208] M. Kliemant, R. Sahoo, T. Schuster, R. Stock, *Global Properties of Nucleus-Nucleus Collisions*. Em S. Sarkar, H. Satz, B. Sinha, Eds., *The Physics of the Quark-Gluon Plasma: Introductory Lectures*, Vol. **785** da *Lecture Notes in Physics*, Cap. 2, Págs. 23–103 (Springer, Berlin, 2010). 96, 98
- [209] R. Hagedorn, *This Week's Citation Classic: Statistical Thermodynamics of Strong Interactions at High Energies*. *Nuovo Cimento Suppl.* **3:147–86**, 1965, *Curr. Contents/Eng. Tech. Appl. Sci.* **21**, 20–20 (1984). 96
- [210] C-Y. Wong, *Introduction to High-Energy Heavy-Ion Collisions* (World Scientific, Singapura, 1994). 96, 100, 101
- [211] G. Arfken, H. Weber, F.E. Harris, *Mathematical Methods for Physicists: A Comprehensive Guide* (Academic Press, Massachusetts, 7 Ed., 2012). 97

- [212] *Stable Beams at 13 TeV: The LHC is Back in Business, With the Start of Run 2 at a New Record Collision Energy*, *CERN Courier* **55:06**, 25–28 July/September (2015). 97
- [213] J. Rak, M.J. Tannenbaum, *High- p_T Physics in the Heavy Ion Era* (Cambridge University Press, Cambridge, 2013). 97
- [214] C-Y. Wong, G. Wilk, *Tsallis Fits to p_T Spectra and Multiple Hard Scattering in pp Collisions at the LHC*, *Phys. Rev. D* **87**, 114007 (2013). 97, 98, 101
- [215] G. Arnison *et al.* (UA1 Collaboration), *Transverse Momentum Spectra for Charged Particles at the CERN Proton-Antiproton Collider*, *Phys. Lett. B* **118**, 167–172 (1982). 97
- [216] J. Cleymans, G.I. Lykasov, A.S. Parvan, A.S. Sorin, O.V. Teryaev, D. Worku, *Systematic Properties of the Tsallis Distribution: Energy Dependence of Parameters in High Energy Collisions*, *Phys. Lett. B* **723**, 351–354 (2013). 98
- [217] M.D. Azmi, J. Cleymans, *The Tsallis Distribution at Large Transverse Momenta*, *Eur. Phys. J. C* **75**, 430 (2015). 98
- [218] L. Marques, E. Andrade-II, A. Deppman, *Nonextensivity of Hadronic Systems*, *Phys. Rev. D* **87**, 114022 (2013). 98, 101
- [219] L. Marques, J. Cleymans, A. Deppman, *Description of High-Energy pp Collisions Using Tsallis Thermodynamics: Transverse Momentum and Rapidity Distributions*, *Phys. Rev. D* **91**, 054025 (2015). 98, 101
- [220] M. Rybczyński, Z. Włodarczyk, *Tsallis Statistics Approach to the Transverse Momentum Distributions in pp Collisions*, *Eur. Phys. J. C* **74**, 2785 (2014). 98
- [221] C-Y. Wong, G. Wilk, *Tsallis Fits to p_T Spectra for pp Collisions at the LHC*, *Acta Phys. Pol. B* **42**, 2047–2054 (2012). 98, 101
- [222] W.M. Alberico, A. Lavagno, *Non-Extensive Statistical Effects in High-Energy Collisions*, *Eur. Phys. J. A* **40**, 313–323 (2009). 98
- [223] T. Wibig, *The Non-Extensivity Parameter of a Thermodynamical Model of Hadronic Interactions at LHC Energies*, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **37**, 115009 (2010). 98, 100
- [224] M. Rybczyński, Z. Włodarczyk, G. Wilk, *On the Possibility of q -Scaling in High-Energy Production Processes*, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **39**, 095004 (2012). 98
- [225] R.A. Salmeron, *An Introduction to the Search for the Quark–Gluon Plasma in Ultrarelativistic Heavy Ion Interactions*. Em B. Sinha, S. Pal, S. Raha, Eds., *Quark–Gluon Plasma: Invited Lectures of Winter School, Puri, Orissa, India, December 5-16, 1989*, Vol. **09** da *Research Reports in Physics*, Cap. 1, Págs. 1–107 (Springer, Berlin, 1990). 98
- [226] F. Antinori *et al.* (NA57 Collaboration), *Study of the Transverse Mass Spectra of Strange Particles in Pb-Pb Collisions at 158 A GeV/c*, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **30**, 823–840 (2004). 98
- [227] M. Praszalowicz, A. Francuz, *Geometrical Scaling in Inelastic Inclusive Particle Production at the LHC*, *Phys. Rev. D* **92**, 074036 (2015). 98
- [228] A. Adare *et al.* (PHENIX Collaboration), *Measurement of Neutral Mesons in pp Collisions at $\sqrt{s}=200$ GeV and Scaling Properties of Hadron Production*, *Phys. Rev. D* **83**, 052004 (2011). 98
- [229] V. Khachatryan *et al.* (CMS Collaboration), *Transverse-Momentum and Pseudorapidity Distributions of Charged Hadrons in pp Collisions at $\sqrt{s}=7$ TeV*, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 022002 (2010). 98, 100
- [230] B. Abelev *et al.* (ALICE Collaboration), *Neutral Pion and η Meson Production in Proton-Proton Collisions at $\sqrt{s}=0.9$ TeV and $\sqrt{s}=7$ TeV*, *Phys. Lett. B* **717**, 162–172 (2012). 98

- [231] S. Chatrchyan *et al.* (CMS Collaboration), *Study of the Inclusive Production of Charged Pions, Kaons, and Protons in pp Collisions at $\sqrt{s} = 0.9, 2.76$ and 7 TeV*, *Eur. Phys. J. C* **72**, 2164 (2012). 98
- [232] K. Aamodt *et al.* (ALICE Collaboration), *Transverse Momentum Spectra of Charged Particles in Proton-Proton Collisions at $\sqrt{s} = 900$ GeV with ALICE at the LHC*, *Phys. Lett. B* **693**, 53–68 (2010). 98, 99, 100, 103
- [233] S. Chatrchyan *et al.* (CMS Collaboration), *Charged Particle Transverse Momentum Spectra in pp Collisions at $\sqrt{s} = 0.9$ and 7 TeV*, *J. High Energy Phys.* **08**, 86 (2011). 99, 100, 103
- [234] G. Aad *et al.* (ATLAS Collaboration), *Charged-Particle Multiplicities in pp Interactions Measured with the ATLAS Detector at the LHC*, *New J. Phys.* **13**, 053033 (2011). 99, 100, 103
- [235] D. Sornette, *Discrete-Scale Invariance and Complex Dimensions*, *Phys. Rep.* **297**, 239–270 (1998). 100
- [236] R.O. Vallejos, R.S. Mendes, L.R. da Silva, C. Tsallis, *Connection Between Energy Spectrum, Self-Similarity, and Specific Heat Log-Periodicity*, *Phys. Rev. E* **58**, 1346–1351 (1998). 100
- [237] L.R. da Silva, R.O. Vallejos, C. Tsallis, R.S. Mendes, S. Roux, *Specific Heat of Multifractal Energy Spectra*, *Phys. Rev. E* **64**, 011104 (2001). 100
- [238] G. Wilk, Z. Włodarczyk, *Tsallis Distribution with Complex Nonextensivity Parameter*, *Physica A* **413**, 53–58 (2014). 100
- [239] G. Wilk, Z. Włodarczyk, *Quasi-Power Laws in Multiparticle Production Processes*, *Chaos Soliton. Fract.* **81**, 487–496 (2015). 100
- [240] A. Deppman, *Thermodynamics with Fractal Structure, Tsallis Statistics, and Hadrons*, *Phys. Rev. D* **93**, 054001 (2016). 101
- [241] G.D. Westfall, J. Gosset, P.J. Johansen, A.M. Poskanzer, W.G. Meyer, H.H. Gutbrod, A. Sandoval, R. Stock, *Nuclear Fireball Model for Proton Inclusive Spectra from Relativistic Heavy-Ion Collisions*, *Phys. Rev. Lett.* **37**, 1202–1205 (1976). 101
- [242] C.M.G. Lattes, Y. Fujimoto, S. Hasegawa, *Hadronic Interactions of High Energy Cosmic-Ray Observed by Emulsion Chambers*, *Phys. Rep.* **65**, 151–229 (1980). 101
- [243] K.C. Chung, *Introducao à Fisica Nuclear* (Editora da Universidade do Estado do Rio de Janeiro – EdUERJ, 2001). 101
- [244] A. Deppman, *Self-consistency in Non-Extensive Thermodynamics of Highly Excited Hadronic States*, *Physica A* **391**, 6380–6385 (2012). 101
- [245] A. Deppman, *Properties of Hadronic Systems According to the Nonextensive Self-Consistent Thermodynamics*, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **41**, 055108 (2014). 101
- [246] C. Kittel, H. Kroemer, *Thermal Physics* (W.H. Freeman and Company, New York, 2 Ed., 1980). 102
- [247] D.B. Walton, J. Rafelski, *Equilibrium Distribution of Heavy Quarks in Fokker-Planck Dynamics*, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 31–34 (2000). 103
- [248] I.M. Sokolov, *Thermodynamics: Not Hotter Than Hot (News & Views)*, *Nature Phys.* **10**, 7–8 (2014). 104
- [249] J. Dunkel, S. Hilbert, *Consistent Thermostatistics Forbids Negative Absolute Temperatures*, *Nature Phys.* **10**, 67–72 (2014). 104
- [250] S. Hilbert, P. Hänggi, J. Dunkel, *Thermodynamic Laws in Isolated Systems*, *Phys. Rev. E* **90**, 062116 (2014). 104

- [251] J.M.G. Vilar, J.M. Rubi, *Communication: System-Size Scaling of Boltzmann and Alternate Gibbs Entropies*, *J. Chem. Phys.* **140**, 201101 (2014). 104
- [252] D. Frenkel, P.B. Warren, *Gibbs, Boltzmann, and Negative Temperatures*, *Am. J. Phys.* **83**, 163–170 (2015). 104
- [253] M. Baranger, *Why Tsallis Statistics ?*, *Physica A* **305**, 27–31 (2002). 104

Referências Suplementares

- [S1] http://www.cbpf.br/~cirto/MecEstNaoExten_HTML. Página do curso de Mecânica Estatística Não Extensiva ministrado pelo Prof. Tsallis no CBPF em 2012. Diversas referências sobre a teoria, razoavelmente ordenadas por temas e com breves comentários, podem ser acessadas neste sítio.
- [S2] <http://tsallis.cat.cbpf.br/TEMUCO.pdf>. Bibliografia permanentemente atualizada sobre a mecânica estatística não extensiva.