TESE DE DOUTORADO

Mecânica estatística não-extensiva em sistemas complexos: fundamentos dinâmicos e aplicações

Luis Gregorio Moyano

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, 2006 Mecânica estatística não-extensiva em sistemas complexos: fundamentos dinâmicos e aplicações

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

> > Rio de Janeiro, Março de 2006

À Capitana A mi familia

Agradecimentos

Meu primeiro e enormemente grande agradecimento vai para minha esposíssima, Tati, com todo o meu carinho, porque simplesmente ilumina cada instante da nossa vida. Pela tua paciência, coragem, compreensão e amor, que têm sido gigantescamente gigantes, te agradeço. Espero estar à altura quando seja a tua vez. Ainda. (muito).

Aos meus irmãos, Dieguito, Luluza, Negrito, Piter, Yoni, Maria, Seba, Caio e Tiago, por serem meus maiores amigos e por estarem sempre perto, no coração, aqui.

Aos meus pais, Manacha e Om, porque é só graças a eles que o leitor está lendo isto. Embora tenha sido uma ajuda, não agradeço tanto pela razão biológica, mas agradeço especialmente por uma razão espiritual. Foram eles os que me deram a liberdade, a curiosidade e a possibilidade de me maravilhar com o mundo. Enormes gracias con el cuore en las manos.

Ao meu orientador, Constantino, com quem aprendi inúmeras coisas, muitas em relação à nossa atividade de pesquisa e tantas outras de vida. Ele me permitiu participar de um mundo vertiginoso de descobertas. Entusiasmo, inteligência, energia e dedicação são palavras curtas demais para descrevê-lo. Do aluno ao mestre, muchas gracias!

Aos meus colegas com os quais colaborei ao longo deste trabalho, grande parte do qual é graças a eles, por muitas, interessantes e estimulantes horas de discussão sobre as perguntas e respostas do mundo. A Fulvio Baldovin, Ana Majtey, Silvio Duarte Queiroz, Jeferson de Souza, Celia Anteneodo, Marcelo e Márcio Portes de Albuquerque, Alberto Robledo, Murray Gell-Mann, John Marsh, Miguel Fuentes, obrigado a todos, com admiração.

À minha familia próxima, Dalai, Mima, César e Laura, pelo carinho e companhia, pelas

muitas e saborosas comidas, pelos muitos momentos agradáveis, muito obrigado.

Aos meus amigos da vida, Euge, Diego, Leo, Robert + Andre = Joaquin!, Lean, Cuchu, Rolo, Sabi. Na memória de tantas horas de partilhar a vida, com a simples palavra, o sutil silêncio ou a inacreditável loucura, a eles minha gratidão por tanta filosofia, tanta alegria e amizade.

Aos meus amigos que de uma maneira ou outra têm a ver com a mítica Casa 1, Pablo, Gil, Mari e Javi, Marina e Alejandro. A Pancho, Damián, Nemésio, Edgardo, Olivier e Julio. Pela amizade, pela música e a alegria, abraços a todos eles.

Ao CBPF e seus professores, que ajudaram e apoiaram minha formação. Meu grande agradecimento a Evaldo Curado, Fernando Nobre, Ernesto Borges, Garin Añaños, Nunô, Diogo e R. Vallejos. À cotidiana companhia de Luzia, Vanda, Almério, Myriam, Ricardo e Regininha, pessoas sempre cheias de energia e atitude positiva. Obrigado.

Agradeço à agência financiadora CNPq pelo apoio a este projeto.

E finalmente devo agradecer a este Brasil fantástico que me brindou tanto do seu entusiasmo e riqueza; ele foi meu lar por muito tempo, e seguirá sendo sempre.

Este trabalho é ao mesmo tempo o fim duma etapa e o começo de outra. Não é senão um ciclo, uma porta no caminho. A todos os que me ajudaram chegar até aqui, obrigado.

Resumo

Exploramos as conexões entre diversos tipos de sistemas complexos e a mecânica estatística não-extensiva. Estudamos os fundamentos dinâmicos deste formalismo, abordando a relação entre dinâmica microscópica e comportamento emergente. Analisamos a aplicação da mecânica estatística não-extensiva tanto em modelos simples quanto em sistemas reais. Nossos principais resultados são:

- Estudamos sistemas probabilísticos formados por N variáveis aleatórias binárias com correlações globais invariantes de escala. Estas correlações são introduzidas impondo a regra de Leibniz na probabilidade baseada no chamado q-produto. Mostramos que, no limite de $N \gg 1$, as distribuições emergentes são q_e -Gaussianas e estabelecemos numericamente a relação $q_e = 2 - \frac{1}{q}$. Este estudo abre a possibilidade de uma q-generalização do Teorema do Limite Central no contexto da mecânica estatística não-extensiva, onde o caso particular $q = q_e = 1$ recupera o bem conhecido teorema de *de Moivre-Laplace*.
- Analisamos diferentes conexões entre mecânica estatística não-extensiva e sistemas conservativos de muitos corpos. Introduzimos e estudamos numericamente um sistema de N mapas standard global e simpleticamente acoplados localizados regularmente em uma dimensão d = 1. O acoplamento é modulado através de um fator α, sendo as interações de longo alcance quando 0 ≤ α ≤ 1 e de curto alcance quando α > 1. Verificamos que, no caso de longo alcance, o sistema apresenta caos fraco no limite termodinâmico N → ∞. No caso de curto alcance, o comportamento é fortemente caótico. Mostramos que, para certos valores dos parâmetros, o sistema

se caracteriza por ter platôs meta-estáveis com uma duração que diverge no limite termodinâmico. Estes resultados sugerem fortes similaridades com o modelo Hamiltoniano α -XY.

- Investigamos as anomalias na difusão observadas no Hamiltoniano de campo médio. Quando preparado adequadamente, se sabe que este sistema apresenta estados metaestáveis de longa duração, onde as coordenadas mostram superdifusão. Mostramos que as funções de densidade de probabilidade destas coordenadas são do tipo q-Gaussianas, com parâmetro q crescente com o tempo, começando com $q \approx 1$ no estado quase-estacionário e finalmente atingindo o valor estacionário $q \simeq 3/2$ depois da relaxação da temperatura. Verificamos que o movimento superdifusivo nas trajetórias dos estados quase-estacionários dependem fortemente do tamanho do sistema.
- Analisamos o princípio zero da termodinâmica aplicado nestes estados quase-estacionários. Discutimos a possibilidade de medir a temperatura dos estados fora de equilíbrio usando um termômetro cujos elementos tem interações de curto alcance. Nossos resultados indicam a possibilidade de que estes conceitos básicos podem se aplicar aos sistemas que a mecânica estatística não-extensiva visa descrever.
- Implementamos um cálculo que permite uma comparação direta entre uma dinâmica Hamiltoniana e a distribuição canônica de Boltzmann-Gibbs no espaço de fases Γ de Gibbs. Aplicamos este procedimento a dois modelos paradigmáticos com interação com primeiros vizinhos, o modelo XY ferromagnético e o modelo β de Fermi-Pasta-Ulam. Mostramos que, para energias intermediárias, a distribuição de equilíbrio de Boltzmann-Gibbs é uma conseqüência da segunda lei de Newton ($\mathbf{F} = m\mathbf{a}$). Para energias maiores discutimos a concordância parcial entre médias de *ensembles* e de tempo.
- Exploramos conexões entre a mecânica estatística não-extensiva e as propriedades multifractais de dois observáveis financeiros, o volume negociado e o lucro, nos títulos das companhias que constituem o índice Dow Jones 30. Mostramos que a natu-

reza multifractal do volume negociado vem essencialmente da forma não-Gaussiana das funções de densidade de probabilidade e de dependências não-lineares. Através desta análise multifractal no *lucro*, discutimos a relação entre as funções de densidade de probabilidade e a sensibilidade às condições iniciais. Estudamos o grau de dependência entre volumes negociados para cada série temporal utilizando uma forma não-extensiva generalizada da medida da informação de Kullback-Leibler. Por último, introduzimos mecanismos dinâmicos estocásticos para ambos observáveis que reproduzem as funções de densidade de probabilidade observadas empiricamente.

Abstract

We analyze the connection between complex systems and nonextensive statistical mechanics through the study of paradigmatic models. We study the dynamical foundations of this formalism, analyzing the relation between macroscopic dynamics and emerging behavior. We examine the applicability of nonextensive mechanics both in simple models and in real systems. Our main results are:

- We study probabilistic systems of N binary random variables with global correlations of scale-free form. These correlations are introduced by imposing the Leibniz rule in the set of probabilities through the so-called q-product, a nonextensive generalization of the usual product. We show that, in the $N \gg 1$ limit, the emerging distributions are q_e -Gaussians, and we establish the relation $q_e = 2 - \frac{1}{q}$ between the two indexes. This study, along with others, opened the possibility for a recently proved q-Central Limit Theorem consistent with the nonextensive formalism, where in the case $q = q_e = 1$ the well-known de Moivre-Laplace theorem is recovered.
- We analyze various connections between nonextensive statistical mechanics an manybody conservative systems. We introduce, and numerically study, a N standard map system with global, symplectic coupling, regularly arranged in d = 1. The coupling is modulated through an α parameter, where interactions are long range when $0 \le \alpha \le 1$ and short-range when $\alpha > 1$. We verify that, in the case of longrange, the system presents *weak chaos* in the thermodynamical limit $N \to \infty$. When interactions are short-range, the systems behaves with *strong chaos*. We exhibit that, for certain values of the system parameters, the system characterizes for having

metastable plateaux whose duration diverges in the thermodynamical limit. Our results suggest strong similarities with the well-known α -XY Hamiltonian model.

- We investigate the anomalies in the diffusion observed in the Hamiltonian Mean Field model. When suitably prepared, it is well known that the system presents long-lasting quasi-stationary states (QSS), where the coordinates present superdiffusion. We report that the probability density functions for the coordinates are q-Gaussians, with a q index that increases with time from $q \approx 1$ in the QSS to finally reach $q \simeq \frac{3}{2}$ after the temperature relaxation. We verify that the superdiffusive motion in the QSS has a strong dependence with the size of the system.
- In the same model, we analyze the zeroth principle of thermodynamics applied to these quasistationary states. We discuss the possibility of measuring the temperature of the out-of-equilibrium states using a short-range interacting thermometer. Our results indicate the possibility that these basic concepts may be applied to the type of systems that the nonextensive formalism aims to describe.
- We implement a general numerical calculation that allows for a direct comparison between nonlinear Hamiltonian dynamics and the Boltzmann-Gibbs canonical distribution in Gibbs Γ -space. We perform this calculation to paradigmatic first-neighbor models, namely, the inertial XY ferromagnet and the Fermi-Pasta-Ulam β -model. We show that, at intermediate energies, the Boltzmann-Gibbs equilibrium distribution is a consequence of Newton second law ($\mathbf{F} = m\mathbf{a}$). At higher energies we discuss partial agreement between time and ensemble averages.
- We explore the connections between nonextensive statistical mechanics and multifractal properties of financial observables. in particular, we study the *traded volume* and the *returns* by means of analysis of the equities of the constituent companies of the Dow Jones Industrial Average index. We verify that the multifractal nature of the traded volume arises essentially from the non-Gaussian shape of the probability density functions as well as from non-linear dependences. Through this multifractal

analysis in the *return*, we discuss the relation between the probability density functions and the sensibility to initial conditions. Moreover, we study the degree of mutual dependence using a *q*-generalized version of the Kullback-Leibler information measure. Finally, we introduce stochastic dynamical mechanisms for both observables that reproduce the empirically observed probability density functions.

Conteúdo

1	Intr	oduçã	o: sistemas complexos e mecânica estatística não-extensiva	1	
	1.1	Sistem	as complexos	3	
		1.1.1	Características da complexidade	4	
		1.1.2	Complexidade e Simplicidade	5	
		1.1.3	Abordagem multidisciplinar	7	
	1.2	Mecân	ica estatística de Boltzmann-Gibbs	8	
		1.2.1	Extensividade e aditividade	9	
		1.2.2	Limitações do formalismo em sistemas complexos	10	
	1.3	Mecân	ica estatística não-extensiva	12	
		1.3.1	Distribuição de equilíbrio da mecânica estatística não-extensiva	13	
		1.3.2	Propriedades matemáticas	15	
		1.3.3	Extensividade de S_q	17	
	1.4	.4 O q -tripleto			
		1.4.1	Sensibilidade às condições iniciais	19	
		1.4.2	Relaxação	20	
		1.4.3	Estado estacionário	21	
		1.4.4	Relação entre os índices do q-tripleto	22	
ი	C: _+		numientes de escolo e tecnome de limite control « monomolizado	n 9	
4	SISU	emas i	nvariantes de escala e teorema do ininte central q-generalizado	23	
	2.1	Teorema do limite central clássico para variáveis de variância finita			
		2.1.1	Teorema do limite central generalizado de Gnedenko e Kolmogorov	25	

	2.2	bilidades hierarquicamente correlacionadas	27				
		2.2.1	O q -produto como gerador do conjunto de probabilidades	28			
		2.2.2	$q\text{-}\mathrm{Gaussianas}$ como distribuições emergentes no limite $N\to\infty$	30			
3	\mathbf{Sist}	Sistemas conservativos discretos					
	3.1	Mapas	s dissipativos, mapas conservativos e sistemas Hamiltonianos	40			
	3.2	Mapas simpléticos e teoria KAM					
		3.2.1	Mapas simpléticos	47			
		3.2.2	Mapa Standard	50			
	3.3	Um m	odelo de mapas simpléticos globalmente acoplados	52			
		3.3.1	Caráter simplético do acoplamento do sistema	53			
	3.4	Sensib	ilidade às condições iniciais	55			
	3.5	Relaxa	ação ao equilíbrio	59			
		3.5.1	Confinamento no espaço de fases	65			
4	Sistemas conservativos contínuos						
	4.1	Sistem	as Hamiltonianos com interações de longo alcance	67			
	4.2	2 Difusão anômala e distribuições não-Gaussianas no modelo HCM $\ .$.					
		4.2.1	Funções de densidade de probabilidade de ângulos	73			
		4.2.2	Difusão anômala e efeitos de tamanho finito	74			
		4.2.3	Discussão	81			
	4.3	4.3 O princípio zero da termodinâmica em estados quase-estacionários		83			
		4.3.1	Relaxação da temperatura dinâmica do ensemble canônico fora do				
			equilíbrio	83			
		4.3.2	Relaxação da temperatura dinâmica de um sistema BG em contato				
			com um sistema não-extensivo	84			
5							
5	Fun	damer	ntação dinâmica do ensemble canônico de BG	90			
5	Fun 5.1	damer Introd	ntação dinâmica do ensemble canônico de BG	90 90			

	5.3	Implementação do cálculo em Hamiltonianos não-lineares de primeiros vizinhos $\ 94$							
		5.3.1	Modelo ferromagnético clássico de rotores XY	94					
		5.3.2	Modelo β de Fermi-Pasta-Ulam $\ .$	99					
6	Aspectos da mecânica estatística não-extensiva em sistemas financeiros 103								
	6.1	Introd	ução	104					
		6.1.1	Equações diferenciais estocásticas	105					
		6.1.2	Superestatística	108					
	6.2	Model	os estocásticos de observáveis financeiros	112					
		6.2.1	Modelo microscópico para o volume negociado	113					
		6.2.2	Modelo estocástico para a dinâmica de lucro	119					
	6.3	3 Estrutura multifractal de variáveis financeiras e conexões com o $q\mbox{-tripleto}$.							
	6.4	4 Generalização da medida de informação mútua para a análise do grau de							
	dependência		dência	129					
7	Conclusões 135								
	7.1	1 Sistemas de probabilidades com correlações globais hierárquicas		136					
	7.2	Sistem	as dinâmicos com interações de longo alcance	137					
	7.3	Sistem	as estocásticos multifractais	141					
A	Dia	gonaliz	zação da matriz de interação de longo alcance R_{ij}	144					
в	Solı	ıção ca	anônica de BG do modelo XY inercial unidimensional e d	0					
	moo	modelo β de Fermi-Pasta-Ulam 14							
	B.1	Model	o <i>XY</i>	146					
		B.1.1	Primeiros vizinhos em $d = 1$	146					
		B.1.2	Alcance infinito	148					
	B.2	Model	o β de Fermi-Pasta-Ulam 	151					

Capítulo 1

Introdução: sistemas complexos e mecânica estatística não-extensiva

Tudo é simples e puro – exceto, é claro, o mundo. Goldenfeld e Kadanoff

Neste trabalho apresentaremos resultados relativos à aplicabilidade da mecânica estatística não-extensiva a distintos tipos de sistemas complexos. É, portanto, uma contribuição aos esforços que vêm se fazendo para entender quais são os limites de aplicabilidade da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs e qual é o papel da mecânica estatística nãoextensiva na generalização deste formalismo. Mais concretamente, os importantes progressos que têm se conseguido nesse sentido sugerem que a mecânica estatística não-extensiva seria aplicável a uma ampla classe de sistemas usualmente chamados "sistemas complexos". Ao longo do trabalho mostraremos resultados sobre diferentes tipos de sistemas complexos.

Uma maneira de justificar a motivação e relevância do trabalho aqui apresentado é indicar o contexto no qual o temos desenvolvido e quais são os objetivos que nos tem orientado ao longo desse processo. Como acabamos de expor, o trabalho desenvolvido é uma descrição (parcial) de certos tipos de sistemas complexos. Assim sendo, é importante fazer um esforço para definir o que é um sistema complexo, já que na literatura não parece ter uma definição direta nem explícita. Na próxima seção vamos explorar diferentes concepções de sistemas complexos. A seguir, apresentamos uma breve descrição dos postulados da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs (BG) que definem sua aplicabilidade. Quando estes postulados, por alguma razão, não podem ser verificados, os sistemas deixam de se ajustar corretamente às predições deste formalismo. Tentativas para descrever este tipo de situações levaram ao surgimento da mecânica estatística não-extensiva, uma generalização da teoria de BG. Finalmente, apresentamos os princípios básicos e exibimos as características mais importantes do formalismo não-extensivo.

O trabalho está organizado em três linhas principais. Primeiramente estudamos conjuntos de probabilidades binárias global e hierarquicamente correlacionadas. Nosso interesse é examinar este tipo de sistemas em função do número de elementos, e em particular o comportamento assintótico quando o tamanho tende a infinito $(N \to \infty)$. Discutimos a possibilidade da generalização do teorema do limite central usual onde se viola o postulado de independência das variáveis.

Na segunda linha de estudo, analisamos diferentes modelos com interações de longo alcance. Primeiramente, introduzimos um novo sistema discreto de N mapas standard acoplados simpleticamente. As interações deste sistema estão reguladas através de um único parâmetro α , que podem ser de curto ou de longo alcance, permitindo a análise das diferenças dinâmicas em função do alcance da interação. Estudamos o comportamento do máximo coeficiente de Lyapunov em função de α assim como aspectos de estados meta-estáveis que surgem com certa classe de condições inicias. Aqui também estudamos o comportamento assintótico no limite de $N \to \infty$, e discutimos a não-comutatividade com o limite $t \to \infty$. Posteriormente abordamos um sistema Hamiltoniano de longo alcance paradigmático, o Hamiltoniano de Campo Médio (HCM). Assim como o sistema anteriormente mencionado, este sistema exibe estados meta-estáveis. Estudamos diversas características como a difusão anômala presente em tais estados e a dependência com o tamanho do sistema. Associado a este resultado, determinamos a forma funcional das distribuições de ângulos e sua dependência temporal. Outros aspectos da termoestatística destes sistemas são abordados. Finalmente a terceira classe de sistemas que examinamos são séries temporais de observáveis financeiros. Analisamos as propriedades multifractais destes dados, estudando as dependências não-lineares e as divergências das funções de densidade de probabilidade da forma Gaussiana. Examinamos uma generalização não-extensiva da medida de informação mútua de Kullback-Leibler. Finalmente propomos modelos estocásticos que encontram boa concordância com os dados observados.

1.1 Sistemas complexos

Através do mundo natural, social e artificial observam-se fenômenos de grande complexidade. Mas as pesquisas na física (e até certo ponto em outros campos como por exemplo a biologia) têm mostrado que os componentes básicos de muitos sistemas são bastante simples. É, então, um problema crucial em muitas áreas da ciência esclarecer os mecanismos matemáticos pelos quais um grande número de elementos simples atuando em conjunto podem produzir o comportamento tão diverso comummente observado.

O uso do conceito de sistemas complexos em tantas disciplinas diferentes produz uma multiplicidade de pontos de vista, até na definição mesma. Não há, pois, uma definição clara e abrangente de sistemas complexos.

Informalmente, podemos definir o termo sistema complexo¹ como um sistema composto por muitas partes, em muitas escalas diferentes, e onde estas partes interagem de uma maneira não-linear. Pelo fato de serem não-lineares, os sistemas complexos são mais do que a soma das suas partes. Mais precisamente, não é mais válido o princípio de superposição que verificam os sistemas lineares. Em conseqüência, o comportamento emergente pode

¹Esta definição foi tomada da *Wikipedia* na Internet. A Wikipedia é uma enciclopédia multilinguística, online e de conteúdo livre. Ela existe como um wiki, um tipo de página-web que permite a qualquer usuário acrescentar ou editar material facilmente e que é especialmente útil para trabalhos em colaboração. A Wikipedia é, portanto, escrita por voluntários do planeta todo, permitindo que a maior parte dos artigos possam ser mudados por qualquer pessoa com acesso à Internet. O curioso nesta definição é que a Wikipedia pode ser considerada, ela mesma, um sistema complexo.

ser muito interessante e usualmente imprevisível.

Os sistemas complexos são modelados usando as técnicas matemáticas dos sistemas dinâmicos, que incluem equações diferenciais, equações de diferenças, mapas, etc. O interesse que abrange o tópico dos sistemas complexos se sobrepõe em muitos aspectos ao de sistemas dinâmicos, mas se considera que os sistemas complexos consistem em um número grande de partes dinâmicas interagentes.

1.1.1 Características da complexidade

Como explicamos anteriormente, não existe uma definição única de sistema complexo. Por isso, a seguir apresentamos, em um sentido mais descritivo, um conjunto de características de sistemas complexos que têm o consenso das diferentes disciplinas naturais, sociais ou artificiais.

Em geral, um grande número de elementos dinâmicos interagentes dão lugar a sistemas complexos. Pode acontecer que estes elementos individuais sejam heterogêneos e, portanto, apresentem diferenças importantes entre si.

Uma característica básica é que a dinâmica individual dos elementos é não-linear, sendo muitas vezes o comportamento caótico. A dinâmica é freqüentemente o resultado da retroalimentação que os elementos recebem como resultado da sua própria atividade.

O maior interesse deste tipo de modelos são os comportamentos macroscópicos que emergem das ações e interações dos elementos individuais. Os elementos individuais que compõem o sistema podem ser muito simples, e a interação entre eles é normalmente simples também. Mas o comportamento do sistema como um todo apresenta uma estrutura (ou em algumas disciplinas, uma inteligência) emergente das muitas interações não-lineares, cada uma delas considerada simples.

As interações não são desprezíveis mesmo com os elementos estando muito distantes em relação a uma distância característica apropriada. A história de um sistema complexo pode ser importante. Os estados passados podem ter uma influência nos estados presentes; a interação temporal pode ser de longo prazo. São comuns os efeitos de memória, correlações no tempo, histerese, envelhecimento, etc.

Assim como regras de acoplamento, a rede dinâmica de um sistema complexo é importante. Redes tipo "mundo pequeno" ou invariantes de escala, que tem muitas interações locais e umas poucas conexões maiores, são muitos comuns. Os sistemas complexos naturais e sociais freqüentemente exibem este tipo de topologias. Por exemplo, o córtex humano, a internet, a Wolrd Wide Web, e muitas outras. Os componentes de um sistema complexo podem ser eles também sistemas complexos, formando distintos tipos de hierarquias. Este tipo de organização pode até mesmo acontecer no espaço de fases do sistema, ou em outros planos ainda menos intuitivos.

Os sistemas complexos naturais são usualmente abertos, ou seja, existem em um gradiente termodinâmico e dissipam energia. Além disso, podem estar fora do equilíbrio, ou em equilíbrios meta-estáveis, e muitas vezes seus limites podem ser difíceis de determinar. A própria definição de limite pode ter de ser decidida arbitrariamente pelo observador.

1.1.2 Complexidade e Simplicidade

Uma maneira muito usada para explicar ou definir os sistemas complexos é observar que estes sistemas tem comportamentos que estão entre a simplicidade e a complexidade. Ao longo desta linha se encontra a maior parte dos esforços por abstrair (e portanto poder definir) as características dos sistemas complexos. Um exemplo é o caso do físico Murray Gell-Mann, que propôs a palavra *plectics*, como uma maneira de denominar a ciência dos sistemas complexos. Segundo Gell-Mann, está palavra esta etimologicamente associada tanto à palavra simplicidade quanto à complexidade. Nesta interessante maneira de abordar o problema, Gell-Mann argumenta que é mesmo muito problemático definir ambas, complexidade e simplicidade. Seriam necessarios muitos conceitos, segundo ele, para explicar os muitos significados implícitos no uso destas duas palavras. Portanto, ele começa a discussão definindo casos específicos de complexidade.

A *complexidade crua* (definida, segundo Gell-Mann, um pouco ingenuamente), é o comprimento da mensagem mais curta que descreve uma entidade (excluindo o próprio nome dessa entidade). Esta descrição depende do nível de detalhe que se usa, o que na física chama-se de *coarse graining*. Além disso, a linguagem usada vai modificar o comprimento dessa mensagem. Finalmente, pode depender também da compreensão prévia do mundo que se tem, ou que se assume.

Uma outra definição, mais técnica é a de conteúdo algorítmico de informação. Suponhamos que uma entidade é descrita em um nível de detalhe, com uma linguagem particular, assumindo um conhecimento e compreensão do mundo, e a descrição é reduzida codificando-a de uma maneira padrão a uma fileira de bits (números um e zero). Consideremos todos os programas que fariam que um computador universal imprima esta fileira de bits e depois pare de calcular. O comprimento deste programa é o chamado conteúdo de informação algorítmica. O conceito foi introduzido por Chaitin e Solomonoff [135] e independentemente por Kolmogorov [136]. Note-se que, além das suposições anteriores, esta definição depende também do procedimento da codificação e do computador universal. Por causa desta dependência, o conteúdo de informação algorítmica tem maior utilidade na comparação de duas fileiras de bits.

Segundo Gell-Mann, existe uma terceira maneira de introduzir o conceito de complexidade. É a chamada *complexidade efetiva* [138], o conteúdo de informação algorítmica das *regularidades* de uma certa entidade, e não de toda a informação (que pode incluir características incidentais). Uma fileira de bits aleatória (e incomprimível, ou seja, não redutível) não tem regularidades, exceto seu comprimento, e tem muito pouca complexidade efetiva. Da mesma maneira, uma fileira extremadamente regular, como por exemplo formada totalmente por números um, também vai ter uma complexidade efetiva muito baixa, já que suas regularidades podem ser descritas sucintamente. Para ter alta complexidade efetiva, uma entidade deve ter um conteúdo de informação algorítmica médio e obedecer um conjunto de regras que requeiram uma longa descrição. Este é um conceito muito próximo ao significado cotidiano de complexo. De fato, e isto é justamente o que se quer significar quando se diz que a gramática de uma língua é complexa, ou que o conglomerado de uma corporação é uma organização complexa, ou que o argumento de um romance é muito complexo - o significado é que a descrição das regularidades levam muito tempo. É por isto que o nome proposto por Gell-Mann, *plectics*, foi sugerido. Os sistemas complexos estão na fronteira entre a regularidade (ordem) e a aleatoriedade (caos forte). No contexto de sistemas dinâmicos, esta classificação corresponde ao regime de caos fraco, ou limiar do caos. Veremos um exemplo deste tipo de comportamento no capítulo 3.

1.1.3 Abordagem multidisciplinar

A teoria de sistemas complexos atravessa as fronteiras comuns das disciplinas científicas convencionais. A região entre regularidade e caos forte que discutimos na seção anterior é característica de muitas disciplinas. Um típico exemplo é a vida, como conceito biológico. E usual ouvir que a vida aparece entre o caos e a ordem. Existem muitos outros exemplos, não só dentro dos sistemas naturais, mas também em outras aéreas como lingüística, sistemas artificiais, teoria da informação, e outros [138]. O qual ressalta um aspecto muito importante dos sistemas complexos: sua abordagem multidisciplinar. Isto significa o reconhecimento de que muitos sistemas, aparentemente diferentes, incluem comportamentos dinâmicos similares como auto-regulação, retroalimentação ou adaptação, e portanto apresentam estruturas fundamentais similares. Estas profundas semelhanças estruturais podem freqüentemente ser aproveitadas para transferir os métodos de análise de uma disciplina a outra. Além de acrescentar maior profundidade na compreensão de sistemas específicos, este tipo de abordagem interdisciplinar ajuda a elucidar possíveis estruturas gerais comuns a todos os sistemas complexos.

Um exemplo é a teoria de sistemas dinâmicos, que foi originalmente desenvolvida para descrever as propriedades globais das soluções de equações diferenciais. Atualmente, esta disciplina vai além do seu objetivo inicial (matemático) incluindo entre outras equações de diferenças, mapas, autômatos celulares e outros, aplicados a muitas disciplinas diferentes, abrangendo sistemas naturais, sociais e artificiais. Outras técnicas matemáticas são usadas no estudo de sistemas complexos como processos estocásticos (Markovianos e não-Markovianos), teoria de jogos, algoritmos genéticos, teoria de grafos, análise de séries temporais, etc. Por outro lado, estas ferramentas matemáticas associadas ao uso do computador, dão lugar à "matemática experimental", a elaboração de modelos formulando regras matemáticas e observando (ou medindo) os resultados. Em geral, os sistemas simples são mais propensos a serem completamente resolvidos através de algum tipo de análise matemática. Quando os sistemas se tornam mais próximos a sistemas reais (ou seja mais complicados) muitas vezes é necessário o uso de simulações computacionais massivas ou de análise numérica para entender como este sistema (mais realista) funciona. Este fato explica o papel central que as simulações computacionais têm na análise de sistemas complexos. Em muitos casos, as simulações computacionais são derivações ou extensões naturais de idéias ou noções vindas de modelos matemáticos simples. Assim, a análise da dinâmica e do comportamento emergente destas simulações podem levar a novos modelos matemáticos e novas hipóteses (e também novos experimentos reais, ou estudos de campo, para testar estes modelos e hipóteses propostos). Como veremos nos capítulos seguintes, ao longo deste trabalho temos usado este tipo de simulações numéricas como uma potente ferramenta de análise e experimentação.

1.2 Mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs

A mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs foi formulada a mais de um século e, desde então, tem tido um sucesso notável para uma enorme variedade de sistemas. A entropia é formulada termodinâmicamente no século XIX por Clausius. Posteriormente, Boltzmann e Gibbs [1] desenvolveram a teoria de da mecânica estatística, com a entropia ocupando um papel central. Eles associaram a idéia termodinâmica de entropia com uma abordagem probabilistica do sistema, onde se tem microestados *i* com probabilidade p_i . Com efeito, a entropia, na forma de Shannon, é

$$S_{BG} = -k \sum_{i=1}^{W} p_i \ln p_i , \qquad (1.1)$$

onde k é uma constante positiva (que sem perda de generalidade consideramos igual à unidade), W é a quantidade de microestados.

Quando se tem equi-probabilidade dos microestados, $p_i = \frac{1}{W}$, (hipótese de eqüiprobabilidade) a entropia S_{BG} pode ser expressada como

$$S_{BG} = k \, \ln W, \tag{1.2}$$

onde k é uma constante positiva, e W é o número de microestados compatíveis com o estado microscópico do sistema isolado. Esta equação, conhecida como o *princípio de Boltzmann*, é uma das expressões fundamentais da mecânica estatística.

E fácil ver que (1.1) satisfaz várias propriedades matemáticas. Entre elas, temos S é não-negativo, côncavo, extensivo e estável (ou experimentalmente robusto).

Desde sua formulação original, existe o interesse em esclarecer se o princípio de Boltzmann deveria ser possível de derivar da dinâmica microscópica [124], já que refere-se a estados microscópicos, mas a implementação deste cálculo ainda não tem se logrado. Com efeito, a mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs (BG) ainda está baseada em hipóteses como a de caos molecular [1] e ergodicidade [166]. Apesar da falta de uma derivação fundamental, a estatística de BG tem tido, sem dúvida nenhuma, enorme sucesso nos sistemas nos quais dominam interações de *curto* alcance espacial ou temporal. Para este tipo de casos, a ergodicidade e a (quase) independência são favorecidas e a abordagem de Khinchin à S_{BG} é valida [166].

1.2.1 Extensividade e aditividade

Os conceitos de aditividade e extensividade são diferentes. Se um sistema A tem uma dada quantidade associada $\mathcal{S}(A)$ esta quantidade é *aditiva* em relação a uma lei de composição particular, se verifica que

$$\mathcal{S}(A+B) = \mathcal{S}(A) + \mathcal{S}(B), \tag{1.3}$$

onde o símbolo + no argumento de S refere-se à lei de composição. Isto é verdadeiro para a maior parte dos sistemas físicos de interesse sob a hipótese de poder desprezar as interações entre elementos pertencentes a diferentes subsistemas. Em particular, não é verdadeiro para sistemas com interações de longo alcance onde as interações entre elementos que pertencem a subsistemas diferentes são comparáveis com as interações dentro de cada subsistema.

No caso de N subsistemas diferentes, a relação 1.3 se generaliza imediatamente da forma

$$\mathcal{S}(\sum_{i=1}^{N} A_i) = \sum_{i=1}^{N} \mathcal{S}(A_i).$$
(1.4)

Para o caso especial de subsistemas *iguais*, $A_i = A$, se tem que

$$\mathcal{S}(\sum_{i=1}^{N} A_i) = \mathcal{S}(N A) = N \mathcal{S}(A).$$
(1.5)

Por outro lado, o conceito de extensividade se relaciona com a seguinte expressão

$$\lim_{N \to \infty} \frac{|\mathcal{S}(N)|}{N} < \infty.$$
(1.6)

Um sistema extensivo tem um comportamento assintótico com o número de subsistemas Ntal que existe um fator de proporcionalidade finito entre $|\mathcal{S}(N)| \in N$. Esta é uma condição mais débil que a de aditividade. Mais precisamente, aditividade em relação a uma dada lei de composição implica extensividade, onde $\lim_{N\to\infty} \frac{\mathcal{S}(NA)}{N} = \mathcal{S}(A)$. Portanto, se pode considerar que um sistema extensivo é assintoticamente aditivo.

Um conceito central na mecânica estatística não-extensiva é o de extensividade, que será discutido ao longo do presente trabalho.

1.2.2 Limitações do formalismo em sistemas complexos

Como base para a discussão deste trabalho, apresentamos os postulados da termodinâmica axiomáticos na forma dada por Callen [18], para sua posterior discussão em relação à mecânica estatística não-extensiva. Os postulados são:

I - Existência de estados de equilíbrio de sistemas simples ² completamente caracterizados macroscopicamente pela energia interna, volume e número de moles de espécies químicas constituintes.

²Entendemos por sistemas simples aqueles macroscopicamente homogêneos, isotrópicos, quimicamente inertes, sem carga elétrica, não sujeitos a campos eletromagnéticos nem gravitacionais e suficientemente grandes para que se possa desprezar qualquer efeito de tamanho finito ou de superfície.

- II Existência da entropia S, função dos parâmetros extensivos de um sistema composto, definida para todos os estados de equilíbrio e que tem a seguinte propriedade: Os valores que tomam os parâmetros extensivos na ausência de vínculos internos são aqueles que maximizam a entropia na variedade dos estados de equilíbrio restritos.
- III A entropia é uma função contínua, diferenciável e monotonamente crescente da energia, e é aditiva sobre os sub-sistemas constituintes.
- IV A entropia se anula na temperatura de zero absoluto.

Destes postulados, é possível definir formalmente outras propriedades como temperatura e pressão, que correspondem ao significado dado pela termodinâmica tradicional. A abordagem de Callen é elegante e concisa, mas não dá nenhuma idéia de como estes postulados podem ser derivados das leis da mecânica.

Callen restringiu a sua análise a sistemas homogêneos, e depois diz demonstrar que a extensividade segue da aditividade. O argumento inclui a hipótese não testada de que as propriedades de um único sistema são idênticas às propriedades de dois sistemas menores com a mesma energia total, volume e número de partículas. Esta hipótese é equivalente à propriedade de extensividade que ele declara ter provado. Isto é válido para virtualmente todos os sistemas físicos, mas não é completamente geral. A extensividade e a limitação a sistemas homogêneos são muito úteis na derivação de identidades termodinâmicas, mas deve ser lembrado que o formalismo completo da termodinâmica não tem tais restrições.

Existem muitos tipos de sistemas (muitas vezes considerados dentro da classe de sistemas complexos) que apresentam desvios em relação às predições do formalismo de BG. Exemplos típicos são sistemas com interações de longo alcance (por exemplo, gravitacionais), sistemas não-lineares no limiar do caos, turbulência, sistemas granulares, entre outros.

Tipicamente, as características dinâmicas nestes tipos de sistemas estão freqüentemente associadas à não-ergodicidade. A ocupação do espaço de fases deixa de ser equiprovável e podem aparecer estruturas não-triviais que invalidem a aplicação da hipótese de caos molecular. Portanto, é necessária uma maneira alternativa de descrever a estatística do sistema.

1.3 Mecânica estatística não-extensiva

Em conseqüência ao exibido na seção anterior, é completamente plausível que outras entropias físicas, em acréscimo à de BG, possam ser definidas com o objetivo de tratar sistemas anômalos, para os quais a hipótese simplificadora de ergodicidade e/ou independência (no sentido de ausência de correlações) não sejam possíveis.

Inspirado por sistemas multifractais, C. Tsallis propôs em 1988 a entropia [2]

$$S_q = k \frac{1 - \sum_{i=1}^{W} p_i^q}{q - 1} \qquad (q \in \Re).$$
(1.7)

A Eq.(1.7) generaliza S_{BG} ($\lim_{q\to 1} S_q = S_{BG}$), como base de uma possível generalização da mecânica estatística de BG [3, 4].

O valor do índice entrópico é uma característica do sistema, ou da classe de universalidade do sistema [57]. Se acredita que o valor de q para um sistema específico deve ser determinado *a priori* da dinâmica microscópica. Isto tem como fundo a discussão sobre a origem dinâmica da mecânica estatística, e que, mesmo no formalismo de BG, ainda não é completamente compreendida.

Além disso, no formalismo não-extensivo surgem outros dois índices q; o conjunto de índices é chamado de q-tripleto relacionados com a relaxação e a sensibilidade às condições iniciais. Na seção 1.4 ampliamos o significado cada um destes índices. Os índices são parte da descrição de diferentes aspectos de um sistema que, no caso do formalismo BG, coincidem e são iguais à unidade. Embora a relação entre eles ainda não esteja completamente entendida, importantes avanços tem sido feitos recentemente [189, 59, 67, 61]. Este importante tópico será ampliado na seção 1.4 e em capítulos posteriores.

O formalismo não-extensivo [2] tem sido objeto de intenso interesse de muitos autores e tem tido enorme sucesso na descrição de fenômenos complexos que, em geral, exibem comportamentos do tipo lei de potência [38, 173] e tem tido muitas aplicações [38] em várias disciplinas. Em particular, em sistemas dinâmicos dissipativos de baixa dimensionalidade, como por exemplo o mapa logístico no limiar do caos [55], sistemas dinâmicos conservativos de baixa dimensionalidade [76], sistemas Hamiltonianos de muitos corpos [96, 111, 109], sistemas quânticos (emaranhamento quântico) [39], turbulência [187], sistemas sociais, financeiros e naturais [173].

Por outro lado, o formalismo tem um sólido fundamento teórico [137, 171], e um semnúmero de resultados analíticos entre os quais destacamos as propriedades da q-entropia: S_q é não-negativa, côncava (estabilidade termodinâmica), estável (experimentalmente robusta), apresenta um paralelo completo com termodinâmica, e teoremas q-invariantes, como o teorema H, a transformada de Legendre, o teorema de Ehrenfest, a igualdade de Pesin, entre muitos outros.

Em particular, um dos pontos mais fortes a favor da mecânica estatística não-extensiva é sem dúvida o fato de ter uma lei de potência (assintótica) como função densidade de probabilidade. Na próxima seção apresentamos a derivação variacional correspondente.

1.3.1 Distribuição de equilíbrio da mecânica estatística não-extensiva

Começamos considerando a versão contínua da q-entropia,

$$S_q = k \frac{1 - \int [p(x)]^q \, dx}{1 - q}.$$
(1.8)

Escolhemos como vínculos de maximização de (1.8)

$$\int p(x) \, dx = 1, \qquad (1.9)$$

que correspondem à normalização, e

$$\int x \frac{\left[p\left(x\right)\right]^{q}}{\int \left[p\left(x\right)\right]^{q} dx} dx \equiv \left\langle x\right\rangle_{q} = \bar{\mu}_{q}, \qquad (1.10)$$

$$\int (x - \bar{\mu}_q)^2 \frac{[p(x)]^q}{\int [p(x)]^q \, dx} \, dx \equiv \left\langle (x - \bar{\mu}_q)^2 \right\rangle_q = \bar{\sigma}_q^2, \tag{1.11}$$

que correspondem à média generalizada e variância de x, respectivamente [4].

A quantidade

$$\frac{[p(x)]^q}{\int [p(x)]^q dx} \tag{1.12}$$

é a probabilidade associada [4] (*escort probability*). Dentro do formalismo não-extensivo existem outras maneiras de fazer médias (a formulação original foi feita com a média usual), que tiveram diversos papeis históricos [3]. Existe uma conexão entre as diferentes maneiras de normalizar, no sentido que existem transformações para passar de uma formulação a outra [5].

Assim obtemos, partindo do problema variacional usando (1.8) com os vínculos indicados acima,

$$p(x) = \mathcal{A}_q \left[1 + (q-1) \mathcal{B}_q \left(x - \bar{\mu}_q \right)^2 \right]^{\frac{1}{1-q}}, \qquad (q < 3), \qquad (1.13)$$

onde,

$$\mathcal{A}_{q} = \begin{cases} \frac{\Gamma\left[\frac{5-3q}{2-2q}\right]}{\Gamma\left[\frac{2-q}{1-q}\right]} \sqrt{\frac{1-q}{\pi}} \mathcal{B}_{q} & \Leftarrow q < 1\\ \frac{\Gamma\left[\frac{1}{q-1}\right]}{\Gamma\left[\frac{3-q}{2q-2}\right]} \sqrt{\frac{q-1}{\pi}} \mathcal{B}_{q} & \Leftarrow q > 1 \end{cases},$$
(1.14)

е

$$\mathcal{B}_{q} = \left[(3-q) \ \bar{\sigma}_{q}^{2} \right]^{-1}.$$
(1.15)

As variâncias usual e generalizada, $\bar{\sigma}^2$ e $\bar{\sigma}_q^2$ respectivamente, estão relacionadas por

$$\bar{\sigma}_q^2 = \bar{\sigma}^2 \frac{5 - 3q}{3 - q} \,. \tag{1.16}$$

Definindo a função q-exponencial como

$$e_q^x \equiv [1 + (1 - q) \ x]^{\frac{1}{1 - q}} \qquad (e_1^x \equiv e^x),$$
 (1.17)

 $(e_q^x = 0 \text{ se } 1 + (1 - q)x \le 0).$

Podemos reescrever a função de densidade de probabilidade (1.13) como

$$p(x) = \mathcal{A}_q \, e_q^{-\mathcal{B}_q(x-\bar{\mu}_q)^2},\tag{1.18}$$

a partir de agora referida como q-Gaussiana.

As q-Gaussianas têm as seguintes propriedades:

- (i) para $q \to 1$ se recupera a Gaussiana usual $p(x) = \mathcal{A}_1 e^{\mathcal{B}_1(x-\bar{\mu}_1)^2}$;
- (ii) para q > 1, emerge uma *cauda* que segue uma lei de potência;
- (iii) para q < 1, o suporte é finito e aparece um corte (*cut-off*) toda vez que o argumento da q-exponencial torna-se negativo.

Note-se que a normalização está definida só para $-\infty < q < 3$.

1.3.2 Propriedades matemáticas

É interessante analisar as relações matemáticas elementares que estão por trás das propriedades do funcional S_{BG} [2] e ver como estas propriedades são generalizadas no âmbito do formalismo não-extensivo. A função exponencial y = ex é solução (com condição inicial y(0) = 0) da equação diferencial

$$\frac{dy}{dx} = y. \tag{1.19}$$

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

$$\ln(x_A x_B) = \ln x_A + \ln x_B. \tag{1.20}$$

No caso de não-linearidade, a mais simples equação que podemos considerar é

$$\frac{dy}{dx} = y^q \quad (q \in \mathbb{R}), \tag{1.21}$$

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

$$y = [1 + (1 - q)x]^{\frac{1}{1 - q}} \equiv \exp_q x \qquad (x \in \mathbb{R}, \ e_1^x \equiv e^x).$$
(1.22)

Mais precisamente, quando q < 1 a função q-exponencial é nula para $x \leq -1/(1-q)$ e cresce monotonicamente de 0 para $+\infty$ quando x varia entre -1/(1-q) e $+\infty$. Quando q > 1 a função q-exponencial é definida para x < 1/(q-1) e cresce monotonicamente entre 0 e $+\infty$ quando x varia entre $-\infty$ e 1/(q-1).

A função inversa, chamada q-logaritmo, é

$$y = \frac{x^{1-q} - 1}{1-q} \equiv \ln_q x \qquad (x \in \mathbb{R}^+, \ \ln_1 x = \ln x), \tag{1.23}$$

e satisfaz à regra de pseudo-aditividade:

$$\ln_q(x_A x_B) = \ln_q x_A + \ln_q x_B + (1 - q)(\ln_q x_A)(\ln_q x_B).$$
(1.24)

Esta importante relação será discutida na próxima seção.

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

Considerando x dentro do domínio de definição das funções correspondentes:

$$\frac{1}{\exp_q x} = \exp_{2-q}(-x), \tag{1.25}$$

$$\ln_q \frac{1}{x} = -\ln_{2-q} x, \tag{1.26}$$

$$\frac{d}{dx}\exp_q x = \left(\exp_q x\right)^q = \exp_{2-\frac{1}{q}}(qx), \qquad (1.27)$$

$$\alpha \ln_q x = \ln_{1-\frac{1-q}{\alpha}} x^{\alpha}, \tag{1.28}$$

 $\forall x, q \in \mathbb{R} \text{ e } \alpha \neq 0$. Podemos portanto dizer que, dado um valor do parâmetro q, ele gera uma *família de valores* a ele associados, tipicamente através das regras (veja também [25]):

inversão:
$$q \rightarrow q' = 2 - q;$$
 (1.29)

diferenciação:
$$q \rightarrow q' = 2 - \frac{1}{q}$$
 (1.30)

$$q$$
-log de potências : $q \rightarrow q' = 1 - \frac{1-q}{\alpha}$. (1.31)

As relações 1.29 são chamadas também de dualidades e usualmente estão presentes em sistemas estudados pela mecânica estatística não-extensiva [24]. Em particular, voltaremos a encontrá-las nos capítulos 2 e 6.

1.3.3 Extensividade de S_q

Da definição 1.7 e da propriedade de pseudo-aditividade do q-logaritmo (Eq. 1.24), temos que

$$S_q(A+B) = S_q(A) + S_q(B) + (1-q) S_q(A)S_q(B),$$
(1.32)

quando $A \in B$ são dois sistemas *independentes* $(p_{ij}^{A+B} = p_i^A p_j^B)$. Esta é a origem do nome *mecânica estatística não-extensiva*. Note-se, porém, que esta equação está formulada para sistemas independentes, o *que não é o caso onde* S_q *se aplica*. É importante notar que S_q *pode* ser extensiva. Por exemplo, para casos especiais de sistemas *correlacionados* (mais precisamente quando o espaço de fases é ocupado de uma maneira invariante de escala), a entropia S_q pode ser *extensiva*, i.e., $S_q (A_1 + A_2 + \ldots + A_N) \simeq \sum_{i=1}^N S_q (A_i)$, Sendo extensiva (para um valor apropriado de q) S_q concorda com o conceito de Clausius sobre entropia microscópica e com termodinâmica.

Mais precisamente, se temos dois sistemas $A \in B$ fortemente correlacionados de alguma forma especial, pode existir um valor especial q^* do parâmetro q tal que

$$S_{q^*}(A+B) = S_{q^*}(A) + S_{q^*}(B), \qquad (1.33)$$

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

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

$$S_q(N) = \ln_q W(N) \sim \frac{\mu^{N(1-q)} - 1}{1-q}$$
 (1.34)

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

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

$$S_q(N) = \ln_q W(N) \sim \frac{N^{\rho(1-q)} - 1}{1-q}$$
 (1.35)

e a extensividade é obtida se e apenas se

$$q = q^* \equiv 1 - \frac{1}{\rho} < 1. \tag{1.36}$$

Em outras palavras, $S_{q^*}(N) \propto N$. Este tópico será discutido com maior detalhe no capítulo 2.

1.4 O q-tripleto

A fundamentação dinâmica da própria estatística de BG é um argumento que ainda tem aspectos básicos em aberto [130, 128, 26, 131]. A mesma questão aparece no contexto da mecânica estatística não-extensiva. Um ponto fundamental para a compreensão deste problema, é conseguir uma determinação *a priori* do parâmetro q, de modo que o conhecimento de aspectos microscópicos leve a uma *predição* do comportamento macroscópico do sistema. Este ponto ainda tem aspectos a serem esclarecidos, embora nos últimos anos vários avanços importantes foram conseguidos. Em geral se acredita que a resposta esteja ligada a uma ocupação parcial (tipicamente multifractal), pela trajetória dinâmica do espaço de fases disponível ao sistema sob determinadas condições macroscópicas. Isto implica a violação da hipótese de ocupação equiprovável dos estados dinamicamente acessíveis, em todas as escalas.

Em relação a esta idéia, algum tempo atrás foi conjecturado por C. Tsallis [140] que, para certa classe de sistemas, seria necessário um conjunto de três índices $(q_{sen}, q_{rel}, q_{est})$ para uma completa descrição do sistema, onde *sen, rel, est* significam, respectivamente, *sensibilidade, relaxação* e *estado estacionário*. Os três índices deste *q*-tripleto se reduziriam a $q_{sen} = q_{rel} = q_{est} = 1$ quando o sistema conviesse com os postulados da teoria de BG. Os sistemas descritos pela mecânica estatística de BG apresentam as seguintes características: (i) As funções de densidade de probabilidade das energias destes sistemas na presença de um termostato é proporcional à função exponencial; (ii) Apresentam forte sensibilidade às condições iniciais, ou seja, esta quantidade aumenta exponencialmente com o tempo (comumente referido como *caos forte*, caracterizado por expoentes de Lyapunov positivos; (iii) Tipicamente, para quantidades básicas macroscópicas, apresentam decaimento exponencial com algum tempo de relaxação. Em outras palavras, estes três comportamentos exibem funções exponenciais(ou seja, q = 1). Analogamente, como vimos na seção 1.4, tem sido conjecturado recentemente [140] que, para sistemas que podem ser estudados pela mecânica estatística não-extensiva, a função densidade de probabilidade (associada a estacionaridade ou meta-equilíbrio), a sensibilidade às condições iniciais, e a relaxação são bem descritas por três índices q_{estac} , q_{sens} , e q_{rel} , referidos como o q-tripleto. Vários sistemas estão sendo estudados neste sentido [189, 190].

1.4.1 Sensibilidade às condições iniciais

Uma característica básica dos sistemas caóticos é a descrição de trajetórias irregulares no espaço de fases. Esta questão tem a ver com a instabilidade do sistema e com o crescimento de entropia. Definimos a sensibilidade às condições iniciais ξ de um sistema dinâmico como

$$\xi(\mathbf{x}(0), \delta \mathbf{x}(0), t) \equiv \lim_{|\delta \mathbf{x}(0)| \to 0} \frac{|\delta \mathbf{x}(t)|}{|\delta \mathbf{x}(0)|},$$
(1.37)

onde $\mathbf{x}(0)$ é a condição inicial no espaço de fases, $\delta \mathbf{x}(0)$ é o vetor distância no espaço de fases e t é o tempo. Quando um sistema é (ou está em um regime) caótico, a sensibilidade às condições iniciais é (assintoticamente) exponencial:

$$\xi = e^{\lambda t},\tag{1.38}$$

onde λ é o *coeficiente de Lyapunov* do sistema. Em geral, esta quantidade é independente de $\mathbf{x}(0)$ e de $\delta \mathbf{x}(0)$. Quando o espaço de fases do sistema tem dimensão d > 1, ele é caracterizado por um *espectro* de coeficientes de Lyapunov $\{\lambda^{(k)}\}_{k=1,2,...d}$. No caso em que o sistema é conservativo, o teorema de Liouville (conservação do volume no espaço de fases) implica que $\sum_{k=1}^{d} \lambda^{(k)} = 0$. Se além de ser conservativo o sistema é simplético (intuitivamente, o sistema verifica a estrutura das equações de Hamilton [46], ampliamos no capítulo 3), o sistema tem *pares* de coeficientes de Lyapunov com o mesmo valor absoluto e distinto sinal.

Quando $\lambda < 0$, as trajetórias com condições iniciais próximas convergem e em conseqüência as órbitas são regulares. Se $\lambda > 0$ as trajetórias se afastam e a dinâmica é caótica. Finalmente, quando o coeficiente máximo de Lyapunov se anula se está em uma situação de caos fraco. Tipicamente, nestes casos a sensibilidade às condições iniciais do sistema é de tipo algébrico. Diversos sistemas físicos, biológicos, econômicos e outros exibem este tipo de situação [137, 171, 173].

O formalismo não-extensivo propõe que em algumas destas situações (por exemplo devido à presença de estruturas fractais no espaço de fases), a sensibilidade às condições iniciais seja dada por q-exponencial [27, 33]:

$$\xi(t) = \exp_q(\lambda_q t) \equiv \left[1 + (1-q)\lambda_q t\right]^{\frac{1}{1-q}}, \qquad q, \lambda_q \in \mathbb{R}$$
(1.39)

onde q é o parâmetro não-extensivo e λ_q o *coeficiente de Lyapunov generalizado* (onde $\lambda \equiv \lambda_1$ quando $q \to 1$). Esta conjectura foi provada analiticamente para bifurcações de forquilha e tangente [55] e no limiar do caos [76, 55] de mapas logísticos (mapas unimodais unidimensionais). Utilizando técnicas de grupo de renormalização, se determinou analiticamente o valor de q e de λ_q .

Note-se, à margem, que da mesma forma que a sensibilidade às condições iniciais exponencial satisfaz a equação diferencial $\dot{\xi} = \lambda \xi$ com condição inicial $\xi(0) = 1$, a sensibilidade q-exponencial é solução da equação $\dot{\xi} = \lambda_q \xi^q$, com o mesmo dado inicial [35].

1.4.2 Relaxação

Como se sabe, se temos um observável arbitrário A(t) (apropriadamente normalizado) que está relaxando a seu valor de estado estável (por exemplo no estado de equilíbrio termodinâmico), é muito freqüente que a equação diferencial associada seja

$$\frac{d\mathcal{O}}{dt} = -\frac{1}{\tau}\mathcal{O},\tag{1.40}$$

onde τ é o tempo de relaxação. A solução a esta equação é

$$\mathcal{O}(t) = e^{-t/\tau}.\tag{1.41}$$

onde o tempo característico da relaxação τ é, em geral, $\tau \sim \lambda$ [45] com $\lambda > 0$. Por outro lado, existem numerosas evidências observadas [110] onde a relaxação não é exponencial. Um exemplo é o caso do limiar do caos no mapa logístico, onde o coeficiente de Lyapunov tende para zero e τ diverge, e onde $q_{rel} = 2.4$ [57]. A relação para descrever este caso é

$$\frac{d\mathcal{O}}{dt} = -\frac{1}{\tau_{q_{rel}}}\mathcal{O}^{q_{rel}},\tag{1.42}$$

onde rel significa relaxação. A solução a esta equação é

$$\mathcal{O}(t) = e_{q_{rel}}^{-t/\tau_{q_{rel}}},\tag{1.43}$$

onde $\tau_{q_{rel}} > 0$ e $q_{rel} > 1$. Relaxação deste tipo é comumente associada a *aging* (envelhecimento) [56, 110]. Em mapas simples unidimensionais, o papel do q_{rel} está relacionado com propriedades básicas como a dimensão fractal do atrator no limiar do caos. Este comportamento não é exclusivo de sistemas de baixa dimensionalidade. Com efeito, tem sido detectado também em sistemas Hamiltonianos [109] e ainda em sistemas artificiais [114], entre outros [115]. Vários aspectos estão atualmente sendo examinados por distintos autores. Por exemplo, a determinação da relação entre este tipo de comportamento dinâmico e a anulação do coeficiente de Lyapunov (caos fraco) [67, 65, 55], a dependência do índice q_{rel} com os outros dois índices q_{sen} e q_{est} [57], e outros.

1.4.3 Estado estacionário

No contexto da termoestatística, na Sec. 1.3.1 apresentamos a derivação variacional da q-Gaussiana (Eq.(1.18)) como a função que maximiza a entropia não-extensiva S_q . Nesse cálculo, q faz referência à distribuição *estacionaria* de um sistema não-extensivo, portanto vamos denotar este índice como q_{est} , onde tipicamente $q_{est} > 1$.

Como veremos no capítulo 6, dedicado a aplicações a sistemas financeiros, este índice descreve as distribuições estacionárias que se obtém em modelos com memória ou estruturas multifractais. Além disso, mostraremos uma possível conexão com o índice q_{sen} , através de uma das relações duais apresentadas nesta seção.

1.4.4 Relação entre os índices do q-tripleto

Existe muito interesse na possibilidade de determinar experimentalmente os índices que conformam o q-tripleto. Em um trabalho recente [189], Burlaga e Viñas do NASA/GSFC, determinaram pela primeira vez os três índices do q-tripleto de dados experimentais. Os autores analisaram os dados obtidos pela sonda *Voyager 1* que desde 1977 fornece a intensidade do campo magnético *B* medida ao longo da sua trajetória. Desde 2004, a sonda se encontra na heliosfera distante (fora do sistema solar) de onde mede o valor de *B* diariamente. A análise destas séries temporais do campo magnético proveu aos autores a função de densidade de probabilidade das flutuações de *B*, de onde se ajustou o valor de q_{est} . Através da análise multifractal (mais precisamente do espectro de singularidades $f(\alpha)$) se determinou q_{sen} . Finalmente, o cálculo da função de auto-correlação foi usado para determinar q_{rel} . Portanto, o q-tripleto completo para este exemplo experimental é $(q_{sen}, q_{rel}, q_{est}) = (-0.6 \pm 0.2, 3.8 \pm 0.3, 1.75 \pm 0.06).$

Surge imediatamente a pergunta: existe uma relação universal entre os três índices? Existem atualmente numerosos esforços na literatura nesta linha [140]. O presente trabalho apresenta diversas conexões em relação a esta questão.
Capítulo 2

Sistemas invariantes de escala e teorema do limite central q-generalizado

Neste capítulo analisamos sistemas de probabilidades com correlações globais. Estas correlações são escolhidas de maneira de preservar um tipo de hierarquia associada a *invariância de escala*. Nossos resultados indicam que, no limite $N \to \infty$, as distribuições emergentes são q_e -Gaussianas [60]. Além disso, apresentamos indicações numéricas de uma possível q-generalização do Teorema do Limite Central (TLC). Com efeito, este trabalho, junto com outros [171, 61], possibilitou recentemente a q-generalização do TLC [73]. Finalmente, analisamos a influência da aplicação de correlações globais na extensividade da entropia, no contexto da mecânica estatística não-extensiva.

2.1 Teorema do limite central clássico para variáveis de variância finita

Consideramos a soma X de duas variáveis aleatórias e independentes $X_1 \in X_2$, cujas distribuições são $P_1(X_1) \in P_2(X_2)$. A probabilidade de que X seja igual a x é dada pela soma de

todas as possibilidades tal que $X_1 = x_1$ e $X_2 = x_2$ de maneira de ter $x = x_1 + x_2$, e pesada pelas probabilidades respectivas. Como as variáveis são independentes, a probabilidade conjunta é o produto das probabilidades $P(x_1)P(x - x_1)$ e então,

$$P(x, N = 2) = \int P_1(x')P_2(x - x')dx'.$$
(2.1)

Esta é a definição de *convolução* entre $P_1(x)$ e $P_2(x)$ e denota-se $P = P_1 \star P_2$. Ou seja, a distribuição da soma de variáveis independentes é a convolução das respectivas funções de densidade de probabilidade. A generalização desta idéia à N variáveis é imediata

$$P(x,N) = \int P_1(x') \dots P_{N-1}(x'_{N-1}) P_N(x - x'_1 - \dots x'_{N-1}) \prod_{i=1}^{N-1} dx'_i.$$
 (2.2)

Se se somam variáveis distribuídas segundo uma função arbitrária $P_1(x_1)$, em geral a distribuição da soma vai ser uma função diferente $P(x, N) = [P_1(x_1)]^{*N}$

Porém, existem certa classe de funções especiais que mantêm a mesma forma funcional. Estas funções são chamadas funções *estáveis*. A função Gaussiana é um exemplo de função estável

$$P_G(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right),\tag{2.3}$$

onde m é o valor médio de x, e σ é p desvio padrão. Uma outra função estável é a de Lévy, que discutiremos na seção seguinte.

As função de Lévy e a Gaussiana, que é um caso especial da de Lévy, são "pontos fixos" da operação de convolução. Mas além disso, elas são também "atratores" no sentido que qualquer distribuição convoluida com se mesma o suficiente número de vezes converge finalmente a uma destas distribuições estáveis. Mais precisamente, a distribuição limite da soma de um grande número de variáveis aleatórias independentes é uma função estável.

A formulação precisa deste resultado é o Teorema do Limite Central. Quando as variáveis que são somadas têm uma distribuição com *variância finita*, temos o Teorema do Limite Central clássico:

$$\lim_{N \to \infty} \mathcal{P}\left(u_1 \le \frac{x - mN}{\sigma\sqrt{N}} \le u_2\right) = \int_{u_1}^{u_2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-u^2/2} du \tag{2.4}$$

para todo valor finito de u_1 e u_2 . Note-se que é fundamental que as variáveis não sejam (muito) correlacionadas [10, 139].

2.1.1 Teorema do limite central generalizado de Gnedenko e Kolmogorov

A generalização do teorema do limite central feita por Gnedenko e Kolmogorov estabelece que a soma de um conjunto de variáveis aleatórias tomadas de distribuições com *caudas* tipo lei de potência, ou seja, que decrescem como $1/|x|^{\alpha} + 1$ onde $0 < \alpha < 2$ (e portanto, com variância *infinita*) tendem à uma distribuição simétrica estável de Lévy quando $N \to \infty$.

Uma distribuição de Lévy estável enviesada é especificada pelo parâmetro de escala c, o expoente α , o parâmetro deslocamento μ e o parâmetro de viés β , sendo que o expoente $\alpha \in (0, 2]$ e o parâmetro de viés $\beta \in [-1, 1]$. Quando o parâmetro de viés é igual a zero, a distribuição é simétrica ao redor de μ . O parâmetro c é o chamado fator de escala, que é uma medida da largura da distribuição e α é o expoente ou índice da distribuição e determina o comportamento assintótico da distribuição $\frac{\alpha C^{\alpha}}{|x|^{1+\alpha}}$.

Finalmente, note-se que esta é só uma possível parametrização usada para distribuições estáveis. Embora seja a mais comum, ela não é contínua nos parâmetros.

Uma distribuição de probabilidades de Lévy estável enviesada g(x) está definida pela transformada de Fourier da sua função característica $\varphi(t)$ [30]

$$g(x;\alpha,\beta,c,\mu) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(t) e^{-itx} dt, \qquad (2.5)$$

onde $\varphi(t)$ é dada por:

$$\varphi(t) = \exp\left[it\mu - |ct|^{\alpha} \left(1 - i\beta \operatorname{sgn}(t)\Phi\right)\right], \qquad (2.6)$$

onde sgn(t) é simplemente o sinal de t e Φ é dado por

$$\Phi = \tan(\pi \alpha/2) \tag{2.7}$$

para todo α exceto $\alpha = 1$, no qual:

$$\Phi = -(2/\pi) \log |t|.$$
(2.8)

O comportamento assintótico descrito em [139]:

$$\lim_{|x| \to \infty} g(x) = \frac{\alpha C^{\alpha}}{|x|^{1+\alpha}}$$
(2.9)

onde C é proporcional a c, mostra que o comportamento de "cauda pesada" é causado pelo fato de que a variância (ou o segundo cumulante) das distribuições de Lévy divergem quando $\alpha < 2$.

Distribuições de Lévy e q-Gaussianas

Como vimos na seção 1.3.1, uma q-Gaussiana está dada por

$$p(x) = \mathcal{A}(q) e_q^{-\mathcal{B}(q)(x-\bar{\mu}_q)^2},$$
 (2.10)

onde A(q) está dada pela Eq. 1.14 (lembramos que a normalização está definida só para $-\infty < q < 3$) e $\mathcal{B}(q) = \left[(3-q) \ \bar{\sigma}_q^2 \right]^{-1}$ [15].

Podemos relacionar a função de Lévy com a q-Gaussiana através do expoente q, e sua relação com α ,

$$\alpha = \frac{3-q}{q-1}.\tag{2.11}$$

ou equivalentemente

$$q = \frac{3+\alpha}{\alpha+1}.\tag{2.12}$$

A função de Lévy tem, como mencionamos antes, $\alpha < 2$. Por outro lado, a q-Gaussiana só pode ser normalizada para q < 3. Estas condições definem que $\frac{5}{3} < q < 3$ é o intervalo de valores de q compatível com uma distribuição de Lévy.

Nos últimos anos, um enorme interesse tem surgido em relação a dinâmica de redes e invariância de escala [12]. Com efeito, o surgimento de novas ferramentas para a abordagem destes sistemas tem tido sucesso em descrever numerosos exemplos de redes invariântes de escala, com a Internet, modelos biológicos entre alguns exemplos duma considerável lista [11].

É muito interessante a perspectiva de aplicar estas novas idéias no campo da física [113]. De fato, uma das principais conjecturas do formalismo não-extensivo é que a ubiqüidade

 $\mathbf{27}$

da sua aplicação venha dada por uma característica universal dos sistemas complexos: a ocupação não-trivial do espaço de fases (possivelmente multi-fractal ou invariânte de escala), onde não se verifica o princípio de equiprobabilidade do formalismo BG. Isto abre novas possibilidades e tem sido a motivação do modelo de correlações globais invariântes de escala que apresentamos a seguir.

2.2 Probabilidades hierarquicamente correlacionadas

Vamos considerar o caso simples onde temos um conjunto de N variáveis aleatórias binárias, idênticas e indistinguíveis. Denotamos como $r_{N,n}$ às probabilidades associadas, que não são necessariamente independentes. Temos, então, N conjuntos de probabilidades com (N+1)elementos em cada um, onde n = 0, 1, 2, ..., N é o índice da variável de cada conjunto. Construímos estes conjuntos através de uma correlação particular que relaciona o conjunto (N + 1) com o conjunto N com o objetivo de que o sistema tenha uma *invariância de escala*. Para isto, definimos que as probabilidades *marginais* do sistema com N elementos sejam iguais às probabilidades *conjuntas* do sistema de (N-1) elementos, impondo a *regra de Leibniz*, que definiremos posteriormente.

O caso trivial é aquele de independência. Consideremos o triângulo de Pascal, ou seja, o triângulo de números cujas fileiras estão formadas por coeficientes binomiais $\binom{N}{n} = \frac{N!}{(N-n)!n!}$. O conjunto $\{\binom{N}{n}/2^N\}$ constitui um conjunto de probabilidades para qualquer N. No limite em que $N \to \infty$ e depois do reescalamento e centrado adequados, este conjunto se aproxima a uma distribuição Gaussiana. Este resultado é conhecido como o teorema de *de Moivre-Laplace*. Se cada uma das variáveis binárias têm probabilidades $p \in 1 - p$, os elementos deste triângulo, para N fixo, estarão dados por $\{\binom{N}{n}p^{N-n}(1-p)^n\}$. No exemplo prévio (o triângulo de Pascal) temos $p = \frac{1}{2}$.

A regra de Leibniz é a receita usada para construir o Triângulo Harmônico de Leibniz [19]. Ela define o conjunto (N) (de N + 1 elementos) a partir de um elemento do conjunto (N) (o elemento inicial) e todos os elementos do conjunto (N - 1) (de N elementos).

$$r_{N,n} + r_{N,n+1} = r_{N-1,n}$$
 $(n = 0, 1, ..., N - 1; N = 2, 3, ...).$ (2.13)

Notamos que cada probabilidade da fileira (N-1) é a soma de duas probabilidades da fileira (N). A regra de Leibniz nos assegura, por construção, que para qualquer conjunto de N variáveis, a soma das probabilidades (cada uma multiplicada pelo fator de degenerescência dado pelo coeficiente binomial adequado) será sempre igual à soma correspondente da fileira anterior. Isto significa que se a soma da fileira (N-1) é igual à unidade (ou seja, um conjunto de probabilidades normalizadas), então em conseqüência também a soma da fileira N o será. Podemos então impor a seguinte normalização

$$\sum_{n=0}^{N} \binom{N}{n} r_{N,n} = 1 \quad (r_{N,n} \in [0,1]; N = 1, 2, 3, ...; n = 0, 1, ..., N).$$
(2.14)

Uma conseqüência da regra de Leibniz é que o conjunto de elementos iniciais $r_{N,\nu}$, onde ν é uma constante no intervalo [0, N], define completamente todos os elementos $r_{N,n}$. Para simplificar, no nosso caso escolhemos $\nu = 0$. A partir da Eq. (2.13) podemos obter uma expressão geral para os elementos,

$$r_{N,n} = \sum_{i=N-n}^{N} (-1)^{i-N+n} \binom{n}{i-N+n} r_{i,0}.$$
 (2.15)

A única pergunta que resta, então, é como escolher o conjunto de elementos iniciais $\{r_{N,0}\}$.

2.2.1 O q-produto como gerador do conjunto de probabilidades

No caso de independência de probabilidades simplesmente teremos $r_{N,0} = p^N$ ($0 \le p \le 1$; N = 1, 2, 3, ...) e portanto $r_{N,n} = p^{N-n}p^n$ (n = 0, 1, 2, ..., N), que é o exemplo dado na seção anterior.

A generalização que propomos aqui está baseada no *q*-produto [20]:

$$x \otimes_q y \equiv [x^{1-q} + y^{1-q} - 1]^{1/(1-q)} \quad (x, y \ge 1; q \le 1).$$
(2.16)

Este produto generalizado tem as seguintes propriedades:

- (i) $x \otimes_1 y = x y$
- (ii) $x \otimes_q 1 = x;$
- (iii) $\ln_q(x \otimes_q y) = \ln_q x + \ln_q y$
- (iv) $\frac{1}{x\otimes_q y} = \left(\frac{1}{x}\right) \otimes_{2-q} \left(\frac{1}{y}\right).$

O q-produto aparece naturalmente no formalismo da mecânica estatística não-extensiva [20]. Por exemplo, se a distribuição de probabilidades no espaço de fases é uniforme dentro de um volume W, a entropia S_q esta dada por $S_q = \ln_q W$. Se interpretarmos o termo à direita da propriedade (iii) como $S_q(A) + S_q(B) = S_q(A+B)$, onde $A \in B$ são subsistemas que não são independentes, se tem que $W_{A+B} = W_A \otimes_q W_B$. Este fato conecta o presente trabalho com [171, 61], onde os autores estudam as propriedades assintóticas de S_q em sistemas correlacionados. A possibilidade de uma correspondência entre este q-produto com um q-TLC já tem sido conjecturada [17], e algumas tentativas nesta direção já existem na literatura [21, 22].

Definimos, então, os elementos iniciais da seguinte forma

$$(1/r_{N,0}) = (1/p) \otimes_q (1/p) \otimes_q (1/p) \otimes_q \dots \otimes_q (1/p), \qquad (2.17)$$

que, pela propriedade (v) é igual a

$$r_{N,0} = p \otimes_{2-q} p \otimes_{2-q} p \otimes_{2-q} \dots \otimes_{2-q} p = 1/[Np^{q-1} - (N-1)]^{1/(1-q)}.$$
 (2.18)

Assumindo que 0 , podemos ver que se <math>q = 1 então $r_{N,0} = p^N = e^{-N \ln(1/p)}$, recuperando o caso de independência.

Para q < 1, que $r_{N,0} \sim \frac{1}{[(1/p)^{1-q}-1]^{1/(1-q)}} \frac{1}{N^{1/(1-q)}} \propto 1/N^{1/(1-q)}$ $(N \to \infty)$. Combinando as equações (2.15) e (2.18), obtemos a forma explícita para qualquer elemento de nosso exemplo

$$r_{N,n} = \sum_{i=N-n}^{N} (-1)^{i-N+n} \binom{n}{i-N+n} \frac{p}{[i-(i-1)p^{1-q}]^{\frac{1}{1-q}}}.$$
 (2.19)

Note-se que $(q, p) = (0, \frac{1}{2})$ reduz ao triângulo de Leibniz usual (ou seja, $r_{N,0} = 1/(N+1)$) [19].

2.2.2 q-Gaussianas como distribuições emergentes no limite $N \rightarrow \infty$

Estudamos numericamente nosso modelo em função do índice q para $N \gg 1$ e valores típicos de p. Começamos nossa análise para $p = \frac{1}{2}$ Para calcular os valores das probabilidades $r_{N,n}$ da Eq. (2.19) usamos uma livraria especial de precisão arbitrária [23] para poder evitar os efeitos da série alternada (ou seja, a subtração de dois números grandes quase iguais), cujo erro relativo cresce muito rapidamente com o número de elementos N. Nossos resultados foram calculados, em geral, com D = N/2 casas decimais significativas.



Figura 2.1: $\ln_{-\frac{4}{3}} \frac{f(x)}{f(0)}$ em função de x^2 para $(q, p) = (\frac{3}{10}, \frac{1}{2})$, e N = 1000. Em linha tracejada, mostramos o valor médio das duas partes (positiva e negativa) da distribuição. Na figura inserida mostramos f(x) em escala duplamente linear.

Para o caso $p = \frac{1}{2}$, onde $N \gg 1 e q \leq 1$, nossos resultados indicam que as probabilidades



Figura 2.2: $\ln_{-\frac{4}{3}} \frac{f(x)}{f(0)}$ em função de x^2 para $(q, p) = (\frac{3}{10}, \frac{1}{2})$ e vários valores do tamanho do sistema N. Na figura inserida mostramos a dependência com N da inclinação (negativa) das linhas retas da figura \ln_{q_e} em função de x^2 .

 $\binom{N}{n}r_{N,n}$ se aproximam claramente a q_e -Gaussianas (ver Figuras 2.1 e 2.2)

$$f(x) = A(q_e)\sqrt{\beta} e_{q_e}^{-\beta x^2},$$
 (2.20)

onde $A(q_e)$ está determinada através de normalização, e $x \equiv \frac{n - (N/2)}{N/2}$ é uma variável convenientemente centrada e escalada.

Podemos ver que existe certa assimetria na distribuição emergente. Mais concretamente, a parte positiva x > 0 e a negativa x < 0 apresentam o mesmo q_e , mas com valores levemente diferentes do parâmetro β . Esta assimetria depende de (q, p, N). Este trabalho visa focar no índice q_e , razão pela qual calculamos a média entre as duas partes $\ln_{q_e}(x) = \frac{1}{2} (\ln_{q_e}(x) + \ln_{q_e}(-x)), x > 0$, e posteriormente ajustamos como se ilustra na Fig. 2.1. O valor de q_e é obtido ajustando à média do resultado numérico (linha tracejada na Fig. 2.1 para vários valores de q_e e escolhendo o que produz maior coeficiente de correlação. Este procedimento foi repetido para pares típicos de (q, p).

Na Fig. 2.2 estudamos o modelo em função do número de elementos N. Exibimos $\ln_{-\frac{4}{3}} \frac{f(x)}{f(0)}$ em função de x^2 , para $(q, p) = (\frac{3}{10}, \frac{1}{2})$. Na figura inserida mostramos explicitamente a dependência com N de β , a inclinação da lei de potência (assintótica). Esta inclinação é igual à variância da distribuição de probabilidades. Portanto, a função $\beta(N) \sim N^{\gamma}$ se pode interpretar como uma equação de *difusão*, onde γ é o expoente de difusão e determina o regime difusivo do modelo. Com efeito, nossos resultados mostram que $\langle (n - \langle n \rangle)^2 \rangle \sim N^2 / \beta(N) \sim a(q)N + b(q)N^2$. Quando q = 1, se tem que a(1) = 1 e b(1) = 0, consistente com difusão normal (como esperado), enquanto que quando q < 1 observa-se a(q) > 0 e b(q) > 0, exibindo portanto difusão balística.

Discutimos a seguir a dependência do índice que caracteriza as distribuições emergentes $q_e \operatorname{com} q$, que define a regra de construção dos conjuntos de probabilidades através do q-produto. Esta relação é exibida na Fig. 2.3. Vemos que os resultados numéricos podem ser bem descritos pela seguinte conjectura:

$$q_e = 2 - \frac{1}{q}$$
 $(0 \le q \le 1).$ (2.21)

Notamos que esta relação pode se pensar como uma composição de duas dualidades, como abordamos na seção 1.3.2 do capítulo 1, presentes freqüentemente na teoria nãoextensiva (ver por exemplo, [24, 21]). No nosso caso, a regra de composição combina a dualidade *aditiva* $q \rightarrow (2 - q)$ com a dualidade *multiplicativa* $q \rightarrow 1/q$.

Caracterização das distribuições emergentes

As distribuições f(x) emergentes são mais complexas para (q, p) arbitrários. Na Figura 2.4 se pode observar o efeito qualitativo de variar p mantendo q fixo (neste caso $q = \frac{7}{10}$). Ao variar p se modifica a coordenada x_0 que corresponde ao máximo da distribuição f(x), ou



Figura 2.3: Relação entre os índices q, da definição do q-produto, com o índice q_e resultante da distribuição de probabilidade calculada numericamente. A concordância com a conjectura analítica $q_e = 2 - \frac{1}{q}$ é notável. Na figura inserida se expande o intervalo $0 < q_e < 1$.



Figura 2.4: Distribuição de probabilidade f(x) para N = 300, para $q = \frac{7}{10}$ e valores típicos de p.



Figura 2.5: Distribuição de probabilidade f(x) para N = 300, para $p\frac{4}{10}$ e valores típicos de q.

seja $f(x_0) \ge f(x) \forall x$. Note-se que para alguns casos não é evidente que x_0 seja equivalente a $df(x)/dx|_{x_0} = 0$, como o caso p = 0.1 na Fig. 2.4. Assim, quando $p < \frac{1}{2}$ $(p > \frac{1}{2})$, nossos resultados mostram que $x_0 < 0$ $(x_0 > 0)$. No caso de $p = \frac{1}{2}$ a coordenada do máximo se mantêm aproximadamente em $x_0 = 0$.

Na Fig. 2.5 exibimos a situação equivalente quando se varia q mantendo p fixo; no nosso caso $p = \frac{4}{10}$. Neste caso, quando q = 1 se tem uma distribuição cujo centro é tipo Gaussiano. A distribuição apresenta uma certa assimetria por ser $p \neq \frac{1}{2}$ (isto não é completamente evidente na figura). Quando q < 1 a distribuição emergente deixa de ter semelhança com uma Gaussiana, apresentando formas funcionais não triviais.

Nas Figuras 2.6 e 2.7 apresentamos resultados equivalentes às duas Figuras anteriores, para vários valores de (p,q). Como esperado, quando $q \approx 1$, o corpo de f(x) é aproximadamente Gaussiano. É interessante notar que, para todos os valores de p, quando $q \approx 1$ a distribuição f(x) apresenta dois pontos de inflexão. Por outro lado, quando $q \ll 1$, f(x)só tem um ponto de inflexão. A passagem de uma situação a outra acontece para valores de q não-triviais.

Na Fig. 2.8 mostramos um diagrama da dependência da coordenada x_0 correspondente



Figura 2.6: Detalhe das distribuições emergentes para valores de $q=0,0.1,0.2,\ldots,0.9$ e0.99



Figura 2.7: Detalhe das distribuições emergentes para valores de $q=0,0.1,0.2,\ldots,0.9$ e0.99



Figura 2.8: Dependência de x_0 com q para vários valores de $p \in N = 300$. Na figura inserida, detalhe do caso $p = \frac{1}{2}$.

ao máximo das distribuições f(x; p, q). Note-se o efeito de saturação quando $p < \frac{1}{2}$, onde para uma fração dos valores de q (começando por $q \ll 1$) temos que $x_0 = 1$. Na figura inserida mostramos o interessante resultado correspondente a $p = \frac{1}{2}$, que indica que existe um certo deslocamento no valor de x_0 para quase todos os valores de q. Isto em parte reflete a assimetria encontrada na distribuição emergente f(x).

Esta assimetria pode ter relação com a escolha particular da função q-produto feita na Eq.(2.17) e utilizada para determinar os elementos iniciais na construção dos $r_{N,0}$. Também tem de se considerar a possibilidade de que este efeito seja causado pela eleição arbitrária de μ . Uma tarefa pendente é determinar a influência destes fatores nas distribuições



Figura 2.9: Dependência de S_{BG} com o número de elementos N para q = 0.3 e q = 0.7. O crescimento é linear, indicando uma produção de entropia finita para q = 1.

emergentes e em particular nas q-Gaussianas.

Extensividade de S_q

Na Fig. 2.9 mostramos como varia S_{BG} com o número de elementos N. O crescimento é linear, o que significa que a produção de entropia por unidade de tempo é finita para q = 1, e portanto verifica o comportamento esperado pela teoria de BG. Esforços nesta direção estão sendo feitos usando outras possibilidades para construir as correlações entre os elementos. Algumas destas possibilidades mantém certa invariância de escala, outras abordam o problema com restrições ainda maiores. Em geral, se encontram distribuições que não são necessariamente Gaussianas nem Lévy, como no caso do modelo aqui apresentado. Em particular, para certos modelos onde se aumenta a influência das correlações, tem se encontrado taxas de produção de entropia finitas para $q \neq 1$, como no caso do mapa logístico [61]. Estes resultados preliminares indicam que a introdução de correlações globais leves em um sistema podem levar a distribuições emergentes não-Gaussianas, mas que não alteram o índice q da entropia que deve-se usar. Por outro lado, se as correlações são suficientemente fortes, podem afastar o valor do índice q da unidade.

Finalmente, queremos destacar que este trabalho tem contribuido à recente q-generalização do TLC [73], para a qual o caso discutido aqui é um caso especial.

Capítulo 3

Sistemas conservativos discretos

Neste capítulo introduzimos um sistema de N mapas standard global e simpleticamente acoplados localizados em uma rede regular de uma dimensão [67, 66]. O acoplamento é modulado através de um fator $r^{-\alpha}$, sendo r a distância entre os mapas. Dessa maneira, as interações são de longo alcance quando $0 \le \alpha \le 1$ e de curto alcance quando $\alpha > 1$. Estudamos a sensibilidade às condições iniciais para as distintas configurações da interação em função do alcance da interação. Verificamos que o sistema apresenta platôs metaestáveis cuja duração diverge no limite termodinâmico. Estes resultados estão relacionados com importantes conjecturas contidas na mecânica estatística não-extensiva. Além disso, sugerem fortes similitudes entre o modelo apresentado e o Hamiltoniano α -XY, também estudado por este formalismo.

3.1 Mapas dissipativos, mapas conservativos e sistemas Hamiltonianos

Como comentamos em capítulos anteriores, a mecânica estatística não-extensiva tem sido amplamente aplicada em sistemas dinâmicos não-lineares [2, 40, 38], já que estes são um dos caminhos mais úteis e comummente usados para modelar fenômenos complexos. Os sistemas Hamiltonianos, por exemplo, fazem parte do núcleo da física e, portanto, sua relevância é evidente. Existe um número importante de resultados na literatura indicando que certos modelos conservativos (por exemplo, o modelo α -XY [80, 85], o modelo α -Heisenberg [41, 42], e modelos tipo o gás Lennard-Jones [43]) podem apresentar comportamentos que se afastam do estabelecido pelo formalismo de BG. Para certas classes de parâmetros e condições iniciais, este tipo de sistema é impedido de acessar o estado de equilíbrio final esperado para tempos finitos quando se toma o limite $N \to \infty$. Em outras palavras, se o limite $N \to \infty$ é tomado antes do limite $t \to \infty$, o sistema deixa de ser ergódico. Esta não-ergodicidade também se reflete em outros aspectos anômalos apresentados por estes sistemas Hamiltonianos, como por exemplo FDP de momentos não-Gaussianas, calor específico negativo, envelhecimento (aging), entre outros [82, 44, 84, 83].

Por outro lado, outros sistemas dinâmicos mais simples, como por exemplo mapas, têm surgido em diversos contextos, freqüentemente exibindo novos e interessantes resultados. Entre estes sistemas se destacam o mapa logístico, o mapa standard, conjuntos de estes mapas acoplados, gás de Lorentz discretizado, entre outros [46, 55].

Sistemas dinâmicos tanto de baixa quanto de alta dimensionalidade tem sido estudados no contexto da mecânica estatística não-extensiva, exibindo muitas ligações com dinâmicas Hamiltonianas [54, 66, 65]. É muito bem sabido que o número de graus de liberdade de um sistema define as possibilidades que a sua dinâmica pode abordar. Enquanto muito se sabe para sistemas com poucos graus de liberdade, a situação é bem mais complicada quando muitos graus de liberdade estão envolvidos. Isto é em parte conseqüência do crescimento extremadamente rápido da dimensão do espaço Γ de fases, d. Além disso, o estudo de sistemas de muitos corpos com tempo contínuo pode ser uma tarefa de muita dificuldade, senão impossível, devido ao considerável tempo computacional que é preciso para integrar as equações de movimento. Isto é particularmente verdadeiro quando forças de longo alcance são incluídas, já que não se pode desprezar nenhuma interação entre os elementos.

Uma alternativa para este problema é a substituição do sistema de tempo contínuo em sistemas mais simples de tempo discreto, por exemplo mapas, que conservam muitas das características mais relevantes da física do sistema original. Esta substituição está, de fato, justificada interpretando o sistema de mapas como a intersecção (no espaço Γ de fases de Gibbs) de um plano de Poincaré com a órbita de um Hamiltoniano de uma dimensão maior.

Tem-se demonstrado que os conceitos da mecânica estatística não-extensiva tem tido um papel importante em sistemas de mapas no limiar do caos. Por exemplo, o arquetípico mapa logístico [46, 72] (dimensão do mapa n = 1, dissipativo, não-linear) é um dos mais importantes sistemas dinâmicos dissipativos e tem sido descrito com muito sucesso. Em parte pela sua simplicidade, este mapa é usualmente utilizado para ilustrar muitas das características mais importantes do caos. Em trabalhos recentes, Robledo e Baldovin [55] tem provado analiticamente, usando técnicas do grupo de renormalização, que a dinâmica do mapa logístico no seu ponto crítico é bem descrita dentro do formalismo da mecânica estatística não-extensiva. A sensibilidade às condições iniciais é uma função q-exponencial e está relacionada com a produção de entropia através de uma identidade tipo Pesin qgeneralizada, vinculando a sensibilidade às condições iniciais com a q-entropia S_q com q = 0.2445..., vinculada às constantes de Feigenbaum do sistema.

Por outro lado, o mapa logístico com ruído (uma generalização tipo Langevin do mapa logístico usual) tem sido estudado em relação a processos de relaxação de dois passos incluindo envelhecimento (apresentando interessantes pontos em comum com dinâmica lenta de vidros [56]). Outros aspectos do formalismo da mecânica estatística não-extensiva tem sido estudados também no caso mais geral da família de mapas z-logísticos unidimensionais considerando a natureza fractal do atrator [57]. Em relação a sistemas dissipativos de mapas de duas dimensões (n = 2) (como o mapa de Henón ou sua versão linearizada. o mapa de Lozi), os resultados indicam que apresentam o mesmo valor de q que o mapa logístico, sugerindo portanto, uma classe de universalidade comum [58]. Considerando sistemas de mapas conservativos de duas dimensões (n = 2) um exemplo muito interessante tem sido estudado, o mapa triângulo de Casati-Prosen (mixing, ergódico, mas com um expoente de Lyapunov que se anula), em conexão à entropia S_q onde q = 0 [74].

Focando ainda em sistemas conservativos discretos, este tipo de relaxação de dois passos também tem sido encontrado no *mapa standard* de Chirikov-Taylor, um paradigma para sistemas simpléticos de duas dimensões, do qual acrescentaremos uma discussão mais de-

talhada na próxima seção. Este sistema tem sido estudado do ponto de vista da mecânica estatística não-extensiva, em particular acoplando N mapas, com valores de N = 2 até N = 500 [76, 65, 75, 34].

A modo de ilustração, a Fig. 3.1 mostra a evolução da temperatura dinâmica (a seguir, apropriadamente definida) para um, dois, e muitos mapas standard acoplados, para vários valores do parâmetro não-linear do sistema. O acoplamento é simplético através dos momentos (ver [54, 65, 76]). Na Fig. 3.2 mostramos o mesmo sistema para vários valores do número de mapas acoplados. Pode-se ver que a relaxação da temperatura ao valor de equilíbrio depende, para tempos finitos, do valor do parâmetro não-linear e do número de mapas acoplados (parâmetros que definiremos a seguir). Em particular, para certos valores destes parâmetros, o tempo que o sistema permanece no estado de não-equilíbrio (ou meta-equilíbrio) pode ser (arbitrariamente) grande.

Com efeito, para o caso N = 1 (figura acima à esquerda na Fig. 3.1) tem se encontrado que o tempo de crossover, t_c , (apropiadamente definido [76]) diverge quando o valor do parâmetro não-linear *a* tende a uma constante a_c . Mais concretamente, no caso de N = 1tem se encontrado que [76] $t_c (a - a_c)^{-2.7}$. Quando N > 1, $a_c = 0$. No caso N = 2, o tempo diverge como $t_c \sim a^{-5.2}$, e para N = 100, $t_c \sim a^{-7.5}$ [65]. Um comportamento similar ocorre com N. Por exemplo, para o caso a = 0.4, b = 2 o tempo de relaxamento cresce como $t_c \sim N^{1.2}$.

Estes resultados exibem o que dentro do formalismo não-extensivo se conhece como *não-comutatividade dos limites de tamnho e de tempo*. Isto foi conjecturado anos atrás por C. Tsallis [28] em conexão com sistemas de longo alcance. Com efeito, dada uma função f(t, N) que descreve alguma propiedade macroscópica do sistema, se as interações são de curto alcance a ordem destes limites é irrelevante,

$$\lim_{t \to \infty} \lim_{N \to \infty} = \lim_{N \to \infty} \lim_{t \to \infty} .$$
(3.1)

Por outro lado, se as interações são de longo alance (ou se por algum outro motivo, o sistema está confinado a uma parte não-trivial do espaço de fases) esta igualdade não se



Figura 3.1: Temperatura em função do tempo para N mapas standard acoplados, onde N = 1 (acima, esquerda, M = 2592, b não está definido, $p_0 = 0.5 \pm 5 \times 10^{-4}$), N = 2 (acima, direita, M = 1296, b = 2, $p_0 = 0.25 \pm 5 \times 10^{-3}$) e N = 500 (abaixo, M = 500, b = 2, $p_0 = 0.25 \pm 5 \times 10^{-3}$).

verifica,

$$\lim_{t \to \infty} \lim_{N \to \infty} \neq \lim_{N \to \infty} \lim_{t \to \infty},\tag{3.2}$$

os limites não comutam é a forma de abordar o equilibrio pode modificar o estado final do sistema. Veremos mais exemplos deste tipo de sistemas ao longo deste trabalho.

A não-comutatividade dos limites, típica de relaxações com estrutura de dois passos [65], assim como outras características anômalas, sugerem à possibilidade de uma correta descrição por parte da mecânica estatística não-extensiva. Mas, em todos os casos [75, 65, 76], o acoplamento tem sido feito através dos *momentos*. Embora isto possa ter seu interesse,



Figura 3.2: Temperatura em função do tempo para um parâmetro não-linear fixo, e N mapas acoplados. À esquerda N < 50 e à direita N > 50 (a = 0.4, b = 2 em ambos casos).

seria instrutivo considerar um acoplamento nas coordenadas, como acontece em situações mais realistas.

Neste capítulo introduzimos um novo sistema conservativo de mapas global e simpleticamente acoplados de alta dimensionalidade que, como discutimos anteriormente, apresenta muitas das características importantes da dinâmica Hamiltoniana. Nosso propósito será contribuir ao entendimento do papel da mecânica estatística não-extensiva nas características anômalas presentes em sistemas dinâmicos com interações de longo alcance.

3.2 Mapas simpléticos e teoria KAM

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

Sistemas Hamiltonianos independentes do tempo são sistemas dinâmicos caracterizados por um número par de dimensões d = 2n (n é o número de graus de liberdade) e para uma única função, o Hamiltoniano H, que determina um conjunto completo de equações diferenciais para as d variáveis. Consideramos um sistema Hamiltoniano contínuo com ngraus de liberdade que pode ser escrito na forma [47, 49]:

$$H = H_0(I_1, ..., I_n) + \epsilon V(I_1, \theta_1, ..., I_n, \theta_n),$$
(3.3)

onde H_0 é integrável ¹ ($I_1, ..., I_n$ são os seus integrais do movimento), $\epsilon \ll 1$, e V é uma perturbação não-linear. Sob determinadas hipóteses (veja, por exemplo, [47, 49]), para $\epsilon = 0$ as trajetórias ficam confinadas por toros invariantes de dimensão n.

Subconjuntos especiais destes toros são chamados *toros de ressonância*. Especificamente, se introduzimos as freqüências não-degeneradas do movimento não-perturbado ω_j ,

$$\omega_j \equiv \frac{\partial H_0}{\partial I_j} \qquad (j = 1, ..., n), \tag{3.4}$$

temos que a condição

$$\sum_{j=1}^{n} m_j \omega_j = 0 \tag{3.5}$$

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

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

tempos de contato (veja, por exemplo, [50] e referências ali sugeridas). Nestas condições, uma das características principais do caos Hamiltoniano é a *não-ergodicidade*, devida à existência de uma medida finita do volume das ilhas definidas pelos toros KAM. O conjunto das ilhas é um conjunto fractal chamado de *'ilhas-em-torno-de-ilhas'* (ver, por exemplo, [51]) e as camadas estocásticas, nas vizinhanças das bordas das ilhas, têm um papel crucial na dinâmica do sistema.

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

$$E = H_0(\omega_1, ..., \omega_n).$$
(3.6)

No caso n > 2 as camadas estocásticas se fundem em uma única *rede estocástica* conexa que é densa no espaço de fases para todo $\epsilon \neq 0$ [49, 50, 51]. Neste caso se podem ter processos de *difusão de Arnold*. É importante notar que para n = 2 os toros KAM constituem *barreiras completas* para processos difusivos no espaço de fases. De qualquer forma, dentro do mar estocástico, é possível também encontrar conjuntos de Cantor, chamados *cantoros*, que constituem *barreiras parciais* para a difusão (veja [52] para detalhes).

3.2.1 Mapas simpléticos

Uma maneira conveniente para estudar sistemas Hamiltonianos é utilizando mapas simpléticos. Para estudar as propriedades de um sistema isolado (por exemplo, em uma perspectiva microcanônica), pode-se aproveitar o fato que H é constante ao longo de cada trajetória e limitar a análise à hipersuperfície de energia constante no espaço de fases, limitando assim a ordem do sistema para 2n - 1. No contexto da física estatística o interesse é no estudo das trajetórias recorrentes, ou seja, aquelas trajetórias que voltam um número indefinido de vezes às vizinhanças de qualquer parte do espaço de fases que já visitaram uma vez. Neste caso se obtém uma importante simplificação do problema (especialmente para os experimentos numéricos) considerando uma seção de Poincaré do espaço de fases [46, 48]. Isto é obtido seccionando transversalmente a hipersuperfície de energia constante e considerando as sucessivas intersecções de cada órbita com esta superfície transversal ². Desta maneira, passamos de um sistema de tempo contínuo de 2n-1 equações diferenciais para um sistema de *tempo discreto* de $d_M = 2n-2$ equações diferenciais, chamado mapa Hamiltoniano. O mapa $\mathbf{G}(\mathbf{x}) \equiv (G_1(\mathbf{x}), ..., G_{d_G}(\mathbf{x}))$ assim obtido é simplético [46, 47]; isto significa que a matriz Jacobiana do mapa,

$$\mathbf{DG}(\mathbf{x}) \equiv \left(\frac{\partial G_i}{\partial x_j}\right)_{i,j=1,2,\dots,d_G},\tag{3.7}$$

satisfaz a relação

$$\mathbf{DG}^{\dagger} \mathbf{J} \mathbf{DG} = \mathbf{J} \tag{3.8}$$

onde \mathbf{DG}^{\dagger} é a matriz transposta de \mathbf{DG} (real), \mathbf{J} é a matriz de Poisson definida por

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & 0 \end{pmatrix},\tag{3.9}$$

e I é a matriz unitária $d_G/2 \times d_G/2$. Pode ser demonstrado [47] que a condição de simpleticidade implica a *conservação do volume* no espaço de fases:

$$\det\left(\frac{\partial G_i}{\partial x_j}\right) = 1. \tag{3.10}$$

A estrutura simplética implica também no acoplamento em pares do espectro de coeficientes de Lyapunov, com a propriedade que cada elemento do par é o oposto do outro [46, 47] (ver 1.4.1).

Se, dado o ponto \mathbf{x}_0 no espaço de fases consideramos um deslocamento infinitésimo ao longo do vetor tangente \mathbf{y}_0 , a evolução do vetor tangente

$$\mathbf{y}_{t+1} = \mathbf{D}\mathbf{G}(\mathbf{x}_t) \cdot \mathbf{y}_t \tag{3.11}$$

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

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

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

$$\mathbf{y}_{t+1} = \mathbf{D}\mathbf{G}(\mathbf{x}_t) \cdot \mathbf{y}_t$$

= $\mathbf{D}\mathbf{G}^t(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{y}_0$
= $\mathbf{D}\mathbf{G}(\mathbf{x}_{t-1}) \cdot \mathbf{D}\mathbf{G}(\mathbf{x}_{t-2}) \cdot \ldots \cdot \mathbf{D}\mathbf{G}(\mathbf{x}_0).$ (3.12)

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

$$\lambda(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) \equiv \lim_{t \to \infty} \frac{1}{t} \ln \left(\frac{|\mathbf{y}_t|}{|\mathbf{y}_0|} \right)$$
$$= \lim_{t \to \infty} \frac{1}{t} \ln \left| \mathbf{D} \mathbf{G}^t(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{u}_0 \right|.$$
(3.13)

Como o produto de duas matrizes simpléticas A e B é também uma matriz simplética:

$$(\mathbf{A}\mathbf{B})^{\dagger}\mathbf{J}\mathbf{A}\mathbf{B} = \mathbf{B}^{\dagger}(\mathbf{A}^{\dagger}\mathbf{J}\mathbf{A})\mathbf{B} = \mathbf{B}^{\dagger}\mathbf{J}\mathbf{B} = \mathbf{J},$$
(3.14)

temos que $\mathbf{DG}^{t}(\mathbf{x}_{0})$ é simplética. Examinamos as implicações da propriedade de simpleticidade para os autovalores da matriz. Seja **A** simplética, os seus autovalores γ são dados pelas raízes do polinômio característico

$$D(\gamma) \equiv \det(\mathbf{A} - \gamma \mathbf{I}). \tag{3.15}$$

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

$$\mathbf{A} = \mathbf{J}^{-1} (\mathbf{A}^{\dagger})^{-1} \mathbf{J}. \tag{3.16}$$

O polinômio característico se torna então

$$D(\gamma) = \det[\mathbf{J}^{-1}(\mathbf{A}^{\dagger})^{-1}\mathbf{J} - \gamma\mathbf{I}]$$

=
$$\det\{\mathbf{J}^{-1}[(\mathbf{A}^{\dagger})^{-1} - \gamma\mathbf{I}]\mathbf{J}\}$$

=
$$\det[(\mathbf{A}^{\dagger})^{-1} - \gamma\mathbf{I}]$$

=
$$\det(\mathbf{A}^{-1} - \gamma\mathbf{I}), \qquad (3.17)$$

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

É interessante notar que um mapa simplético 2n-dimensional é também o resultado de uma seção de Poincaré no espaço de fases de um sistema *aberto* de n graus de liberdade com uma Hamiltoniana que depende do tempo *periodicamente* (veja, por exemplo, [46]).

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

3.2.2 Mapa Standard

A dimensão mais baixa onde este mecanismo é reproduzido é dada por um mapa bidimensional. Um mapa que neste contexto tem um papel paradigmático análogo ao do mapa logístico para os sistemas dissipativos, é o *mapa standard* (ou mapa de Chirikov-Taylor)[53], que é definido pelas equações

$$\begin{aligned}
\theta(t+1) &= p(t+1) + \theta(t) \pmod{1}, \\
p(t+1) &= p(t) + \frac{a}{2\pi} \sin[2\pi\theta(t)] \pmod{1},
\end{aligned}$$
(3.18)

onde $t = 1, 2, ..., e a \in \mathbb{R}$ é o parâmetro que controla a caoticidade. Como veremos em breve, θ pode ser considerada uma variável angular e p um momento angular (mesmo se definido sob um suporte compacto). Este mapa é integrável para a = 0, enquanto a caoticidade cresce rapidamente com |a|; para o valor crítico $a = a_c \equiv 0,971635406...$ tem-se a quebra do último toro KAM que se estende para todo o intervalo $0 \le \theta < 1$.

O estudo de mapas simpléticos em geral é realizado para caracterizar as propriedades recorrentes de *classes de sistemas Hamiltonianos* sem que seja preciso deduzir de forma explícita as equações do mapa de um Hamiltoniano específico. Mesmo assim, a título de ilustração, pode ser interessante introduzir um modelo físico que gera as Eqs. (3.18). Por isso considere-se a equação de movimento de um *kicked rotor*, ou seja, de um pêndulo *plano* sob a ação de uma força que atua só por valores discretos $\overline{t} = t\tau$ (com t = 0, 1, ...) do tempo contínuo $\overline{t} \in \mathbb{R}$:

$$\frac{d^2\overline{\theta}}{d\overline{t}^2} + \overline{a}\sin\overline{\theta}\sum_{t=0}^{\infty}\delta(\overline{t} - t\,\tau) = 0, \qquad (3.19)$$

onde $\overline{\theta} \in [0, 2\pi)$ é o ângulo. Integrando Eq. (3.19) entre $t\tau < \overline{t} < (t+1)\tau$, temos $d^2\overline{\theta}/d\overline{t}^2 = 0$, ou seja, $d\overline{\theta}/d\overline{t}$ é uma constante que chamamos \overline{p}_{t+1} . Temos como conseqüência

$$\overline{\theta}(\overline{t}) = (\overline{t} - t\,\tau)\,\overline{p}_{t+1} + \overline{\theta}(t\,\tau). \tag{3.20}$$

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

$$\overline{\theta}_{t+1} = \tau \, \overline{p}_{t+1} + \overline{\theta}_t. \tag{3.21}$$

Para obter uma relação de recorrência para \overline{p}_t , integramos agora Eq. (3.19) entre $t\tau - \epsilon$ e $t\tau + \epsilon$, onde ϵ é uma quantidade infinitésima:

$$\int_{t\tau-\epsilon}^{t\tau+\epsilon} d\overline{t} \left[\frac{d^2\overline{\theta}}{d\overline{t}^2} + \overline{a}\sin\overline{\theta}_t \right] = 0 \qquad (\epsilon \to 0).$$
(3.22)

Como

$$\frac{d\overline{\theta}}{d\overline{t}}\Big|_{t\tau+\epsilon} = p_{t+1} \qquad e \qquad \frac{d\overline{\theta}}{d\overline{t}}\Big|_{t\tau-\epsilon} = p_t, \tag{3.23}$$

temos que

$$\overline{p}_{t+1} - \overline{p}_t + \overline{a}\sin\overline{\theta}_t = 0. \tag{3.24}$$

Substituindo Eq. (3.24) na Eq. (3.21) obtemos finalmente

$$\overline{\theta}_{t+1} = \overline{\theta}_t + \left(\overline{p}_t - \overline{a}\sin\overline{\theta}_t\right)\tau. \tag{3.25}$$

Considerando $\tau = 1$ e usando as propriedades de simetria das Eqs. (3.24) e (3.25), podemos redefinir as coordenadas no quadrado unitário (mod 1) obtendo a Eq. do mapa *standard* (3.18).

3.3 Um modelo de mapas simpléticos globalmente acoplados

Nosso modelo é um conjunto de N mapas standard simpleticamente acoplados, onde a escolha particular é feita através das *coordenadas*,

$$\theta_{i}(t+1) = \theta_{i}(t) + p_{i}(t+1) \pmod{1},$$

$$p_{i}(t+1) = p_{i}(t) + \frac{a}{2\pi} \sin[2\pi\theta_{i}(t)] +$$

$$\frac{b}{2\pi\tilde{N}} \sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{N} \frac{\sin[2\pi(\theta_{i}(t) - \theta_{j}(t))]}{r_{ij}^{\alpha}} \pmod{1},$$
(3.26)

onde t é o tempo (discreto) $t = 1, 2, \ldots$ O parâmetro a é o parâmetro usual de nãolinearidade do mapa standard individual, enquanto que o parâmetro b modula a intensidade global do acoplamento de longo alcance. Ambos parâmetros contribuem à não-linearidade do sistema e ele se torna integrável quando a = b = 0. Para descrever o sistema em um espaço de fases finito consideramos, neste caso também, somente o toro (mod 1). Os mapas são localizados regularmente em uma rede de uma dimensão ($\delta = 1$), com condições de borda periódicas. A distância r_{ij} é a distância mínima entre os mapas i e j, portanto, pode variar entre a unidade e $\frac{N}{2} \left(\frac{N-1}{2}\right)$ quando N é par (ímpar). Como conseqüência, α regula o alcance da interação entre os mapas. A soma das interações é global (ou seja, inclui todos os mapas), e portanto os casos limites $\alpha = 0$ e $\alpha = \infty$ correspondem a alcance infinito e alcance de primeiros vizinhos respectivamente. No caso geral, $\alpha/\delta < 1 (\alpha/\delta > 1)$, significa acoplamento de longo (curto) alcance, sendo δ a dimensão da rede subjacente (no nosso caso é $\delta = 1$). Note-se que r_{ij} é uma quantidade constante que, modulada através da potência α , entra na Eq. (3.26) como uma constante de acoplamento efetiva independente do tempo.

O termo de acoplamento é normalizado pelo máximo valor da soma $\tilde{N} \approx \int_{1}^{N} dr \ r^{-\alpha} = \frac{N^{1-\alpha}-\alpha}{1-\alpha}$, para que a soma seja uma quantidade não-divergente quando $N \to \infty$ (ver [77, 85] para mais detalhes).

3.3.1 Caráter simplético do acoplamento do sistema

Como vimos na seção 3.2.1, se $\mathbf{G}(\mathbf{x})$ denota o sistema de mapas, então \mathbf{G} é simplético se sua matriz Jacobiana $\mathbf{DG}(\mathbf{x})$ satisfaz a relação [46]:

$$\mathbf{DG}(\mathbf{x})^T \mathbf{JDG}(\mathbf{x}) = \mathbf{J}, \qquad (3.27)$$

onde o superíndice T indica a matriz transposta, e J é a matriz de Poisson.

Em particular, em nosso modelo

$$\mathbf{DG} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ \mathbf{B} & (\mathbf{I} + \mathbf{B}) \end{pmatrix}, \tag{3.28}$$

onde \mathbf{x} é o vetor de 2N dimensões $\mathbf{x} \equiv (\mathbf{p}, \theta)$, e

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} K_{\theta_1} & c_{21} & \dots & c_{N1} \\ c_{12} & K_{\theta_2} & \dots & c_{N2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ c_{1N} & c_{2N} & \dots & K_{\theta_N} \end{pmatrix},$$
(3.29)

com

$$K_{\theta_i} = a\cos[2\pi\theta_i(t)] + \frac{b}{\tilde{N}}\sum_{j\neq i}\frac{\cos[2\pi(\theta_i(t) - \theta_j(t))]}{r_{ij}^{\alpha}},$$

е

$$c_{ij} = c_{ji} = -\frac{b}{\tilde{N}} \frac{\cos[2\pi(\theta_i(t) - \theta_j(t))]}{r_{ij}^{\alpha}},$$

onde i, j = 1, ..., N. Uma conseqüência da Eq.(3.27) é que o determinante Jacobiano $|\mathbf{DG}| = 1$, indicando que nosso sistema **G** preserva o *(hiper)volume*. Pode-se ver que,

$$\mathbf{D}\mathbf{G}^{T} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{B} \\ \mathbf{I} & (\mathbf{I} + \mathbf{B}) \end{pmatrix}, \qquad (3.30)$$

portanto

$$\mathbf{D}\mathbf{G}^{T}\mathbf{J} = \begin{pmatrix} -\mathbf{B} & \mathbf{I} \\ -(\mathbf{I} + \mathbf{B}) & \mathbf{I} \end{pmatrix}.$$
 (3.31)

esta quantidade, multiplicada (pelo lado direito) pela matriz (3.28) é igual a **J**. Portanto, nosso sistema é simplético. Em conseqüência, os 2N expoentes de Lyapunov $\lambda_1 \equiv \lambda_M, \lambda_2, \lambda_3, ..., \lambda_{2N}$ são acoplados por pares como segue: $\lambda_1 = -\lambda_{2N} \ge \lambda_2 = -\lambda_{2N-1} \ge$... $\ge \lambda_N = -\lambda_{N+1} \ge 0$. Em outras palavras, como função do tempo, um comprimento infinitesimalmente pequeno diverge como $e^{\lambda_1 t}$, uma área infinitesimalmente pequena diverge como $e^{(\lambda_1 + \lambda_2)t}$, um volume infinitesimalmente pequeno diverge como $e^{(\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3)t}$, um hipervolume N dimensional infinitesimalmente pequeno diverge como $e^{(\sum_{i=1}^N \lambda_i)t}$ ($\sum_{i=1}^N \lambda_i$) sendo de fato igual à taxa da entropia de Kolmogorov-Sinai, de acordo com a identidade de Pesin), um (N+1) hipervolume de (N+1) dimensões infinitesimalmente pequeno diverge como $e^{(\sum_{i=1}^{N-1} \lambda_i)t}$, e assim em diante. Por exemplo, um hipervolume de (2N-1) dimensões diverge como $e^{\lambda_1 t}$, e finalmente o hipervolume de 2N dimensões permanece constante, portanto recuperando a natureza conservativa do sistema.

Como antecipamos anteriormente, modelos similares já foram estudados na literatura para o caso $\alpha = 0$, mas em contextos diferentes [66, 78, 79]. Esta eleição particular para o acoplamento foi feita visando comparar certas quantidades com sistemas Hamiltonianos de muitos corpos. De fato, é possível obter o conjunto de mapas implementando um procedimento de discretização ao modelo α -XY com um campo externo (para mais detalhes ver [79, 46]).

Como conseqüência de ter (N - 1) termos na soma do acoplamento e o fato de que há N mapas os tempos que requerem as simulações é da ordem $O(N^2)$. Por esta razão, simular numericamente o sistema (3.26) para valores grandes de N não é uma tarefa fácil. Para resolver este problema, aplicamos um algoritmo de cálculo que aproveita a simetria da matriz de acoplamento $R_{ij} = R_{ji}$ da rede [89] e que encurta o tempo computacional a $O(N \log N)$. A implementação deste algoritmo está detalhada no apêndice A.

O papel das condições iniciais

Em todas as nossas simulações usamos condições iniciais aleatórias para as coordenadas e os momentos, sendo em ambos os casos escolhidas das distribuições uniformes $\theta_i \in$ $[\theta_0 - \delta\theta, \theta_0 + \delta\theta]$ e $p_i \in [p_0 - \delta p, p_0 + \delta p]$. Para as coordenadas usamos sempre condições iniciais homogêneas, ou seja, $\theta_0 = 0.5, \ \delta\theta = 0.5$. Para os momentos nos concentramos em dois casos: no estudo da sensibilidade às condições iniciais, usamos uma distribuição homogênea em todo o espaço de fases ($p_0 = 0.5$, $\delta p = 0.5$). Para o estudo da relaxação ao equilíbrio usamos uma faixa estreita onde $p_0 = 0.3$, e $\delta p = 0.05$.

Checamos também outras combinações de condições iniciais, por exemplo distribuições de coordenadas não-homogêneas do tipo $\theta_0 = 0.3$, $\delta\theta = 0.05$. Os resultados relacionados com sensibilidade às condições iniciais são, para tempos suficientemente longos, independentes da eleição das constantes p_0 , δp , $q_0 \in \delta q$. Por outro lado, são fundamentais na maneira em que o sistema relaxa ao equilíbrio, embora sejam qualitativamente similares.

3.4 Sensibilidade às condições iniciais

Para analisar a sensibilidade às condições iniciais estudamos numericamente o máximo coeficiente de Lyapunov (MCL, Eq.(3.13)) e a sua dependência com os diferentes parâmetros do sistema $a, b, \alpha \in N$. Usamos o método usual desenvolvido por Benettin e outros [91].

Como mencionamos anteriormente, uma conseqüência da estrutura simplética de (3.26)é que o espectro de Lyapunov no espaço de fases de 2N dimensões está caracterizado por N pares de coeficientes de Lyapunov, onde cada elemento do par é o negativo do outro. Portanto, o MCL estabelece o limite máximo que o valor absoluto de cada coeficiente do espectro pode ter.

Nos concentramos na evolução do MCL para diferentes valores de N começando com $\theta_0 = 0.5, \, \delta\theta = 0.5, p_0 = 0.5 \, \mathrm{e} \, \delta p = 0.5 \, \forall \, \alpha$. Em uma realização típica, o MCL de tempo finito, λ_M , é um bom estimador do MCL (no sentido que as duas quantidades coincidem quando $t \to \infty$ [92]). Fazemos médias em várias realizações (tipicamente 100) para diminuir as flutuações estatísticas. Verificamos que, para tempos suficientemente longos, λ_M não depende das condições iniciais escolhidas [93].

Na Fig. 3.3 mostramos uma realização típica do cálculo para o MCL em função de N, para $\alpha = 0$ (alcance infinito, ou campo médio). Observamos que depois de um transiente o MCL tende a alcançar um valor definitivo. Na figura inserida vemos que a dependência com o número de mapas acoplados é uma lei de potência. Em particular, quando $N \to \infty$, $\lambda_M \to 0$



Figura 3.3: Máximo coeficiente de Lyapunov em função do tempo para $\alpha = 0$, e vários valores de N. Na figura inserida, a dependência com N e tipo lei de potência.

Na Fig. 3.4 mostramos a dependência de λ_M com N para diferentes valores do alcance da interação α e valores fixos dos parâmetros a = 0.005, b = 2. Nossos resultados mostram que, para $\alpha \leq 1$, o valor de λ_M tende para zero para valores crescentes de N (e portanto, o resto do espectro de Lyapunov também) com uma dependência é tipo lei de potência $\lambda_M \sim N^{-\kappa(\alpha)}$. Para $\alpha > 1$, $\kappa \approx 0$ e λ_M é uma constante positiva. Este resultado mostra que o sistema apresenta *caos fraco* no limite termodinâmico quando as interações são de longo alcance ($\lambda_M \to 0$ quando $N \to \infty$) enquanto que, para interações de curto alcance, λ_M permanece positivo para qualquer N significando uma dinâmica fortemente caótica (como esperado [94, 95, 129]).

É interessante notar que este resultado é muito similar àquele deduzido analiticamente (e também calculado numericamente) para o modelo α -XY [90], sugerindo uma dinâmica



Figura 3.4: Dependência do coeficiente de Lyapunov com o tamanho do sistema N em escala duplo-logarítmica, que mostra que $\lambda_M \sim N^{-\kappa(\alpha)}$. As condições iniciais usadas foram $\theta_0 = 0.5$, $\delta\theta = 0.5$, $p_0 = 0.5$ e $\delta p = 0.5$. Os parâmetros fixos foram a = 0.005 e b = 2. Fizemos médias em 100 realizações. Na figura inserida mostramos κ em função de α , onde se verifica que o sistema tem um regime de *caos fraco* quando $\alpha \leq 1$.

similar. De fato, como se afirma em [86], este tipo de escalamento é típico de sistemas com acoplamentos da forma $1/r^{\alpha}$. Simulações preliminares sugerem que o fato da região de caos fraco se estender um pouco por cima do valor $\alpha = 1$ é conseqüência de efeitos de tamanho e tempo finitos.

A dependência de λ_M com o parâmetro não-linear *a* para diferentes alcances da interação α é mostrada na Fig. 3.5. Pode se ver que para $\alpha < 1$, λ_M decresce quando



Figura 3.5: Dependência do coeficiente de Lyapunov com *a* para diferentes valores de α . As constantes fixas são N = 1024 e b = 2. Condições iniciais correspondem a $\theta_0 = 0.5$, $\delta\theta = 0.5$, $p_0 = 0.5$ e $\delta p = 0.5$. Fizemos médias entre 100 realizações.
a aumenta e satura quando $a \ll 1$. Isto ilustra a influência do termo de acoplamento não-linear. Para valores de *a* crescentes a sensibilidade às condições iniciais aumenta. Por outro lado, o valor de *a* quase não tem efeito quando $\alpha > 1$, onde o λ_M é aproximadamente constante para todo valor de *a*. Quando a > 1, aparece um pequeno incremento de λ_M quando $\alpha > 1$ (similar ao caso de $\alpha \approx 0$), mas o efeito é muito menor (na escala usada na Fig. 3.5 não é perceptível).

Na Fig. 3.6 exibimos a dependência com o parâmetro de acoplamento b em função de α . Para valores altos de b ($b \gg 1$) $\lambda_M = c(\alpha) b^{0.63} \forall \alpha$, onde $c(\alpha)$ é uma função não-linear. Simulações preliminares mostram que este expoente quase não muda com $a \in N$, o que sugere a possibilidade de que seja universal. No caso b = 0, verificamos que $\lambda_M = 0$, $\forall \alpha$. Quando $\alpha > 1$ este escalamento é válido até para $b \ll 1$. Por outro lado, se $\alpha < 1 \in b \ll 1$ verificamos um afastamento desta lei de potência.

Nossa caracterização ilustra o fato de que no caso geral, a sensibilidade às condições iniciais estão fortemente influenciadas pelo alcance das interações. As órbitas são claramente caóticas no caso de curto alcance (como esperado) e encontramos evidências de que o MCL se anula no limite termodinâmico, quando o alcance é longo, mostrando um regime de caos fraco.

3.5 Relaxação ao equilíbrio

Como se explicou anteriormente, o sistema (3.26) é simplético, portanto o volume se preserva no espaço de fases Γ , como no caso Hamiltoniano. Por esta razão podemos interpretar θ como um "ângulo" e p como "momento". Definimos, em analogia à temperatura, o dobro da energia cinética média por partícula [76, 66],

$$T(t) \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left(\langle p_i^2(t) \rangle - \langle p_i(t) \rangle^2 \right), \qquad (3.32)$$

onde $\langle \rangle$ significa médias no ensemble. Esta quantidade é claramente diferente da temperatura física e deve ser interpretada como uma analogia dinâmica. Chamaremos temperatura de Boltzmann-Gibbs, T_{BG} , à temperatura associada a uma distribuição uniforme no espaço



Figura 3.6: Dependência do coeficiente de Lyapunov com *b* em escala duplo-logarítmica. Os parâmetros fixos do sistema são N = 1024 e a = 0.005. As condições iniciais correspondem a $\theta_0 = 0.5, \, \delta\theta = 0.5, \, p_0 = 0.5$ e $\delta p = 0.5$. Fizemos médias entre 100 realizações. Na figura inserida mostramos a mesma dependência em uma escala duplo-linear, incluindo a origem.

de fases completo. Esta quantidade pode ser calculada analiticamente,

$$T_{BG} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left[\int_{0}^{1} dp_{i} \ p_{i}^{2} - \left(\int_{0}^{1} dp_{i} \ p_{i} \right)^{2} \right] = 1/12 \simeq 0.083 \ (\forall N).$$
(3.33)

Estudamos a evolução da temperatura dinâmica T, como no caso da sensibilidade às condições iniciais, para valores diferentes dos parâmetros do sistema, focando na relaxação à T_{BG} . Usamos como condições iniciais uma distribuição homogênea para as coordenadas e uma faixa estreita para os momentos, centrada em $p_0 = 0.3$ e com largura $\delta p = 0.05$.

Nossos resultados mostram qualitativamente o mesmo tipo de relaxação apresentado nas Figuras 3.1 e 3.2, com presença de platôs dependentes dos parâmetros do sistema. Em particular, se verifica também neste modelo a não-comutatividade dos limites $N \to \infty t \to \infty$.

A maneira em que a relaxação ocorre depende fortemente das condições iniciais. Por exemplo, usando $p_0 \ll 1$ faz com que o sistema alcance uma temperatura maior à T_{BG} de uma maneira artificial (embora só temporariamente), como conseqüência das condições de contorno periódicas (toro (mod 1)). Em geral, diferentes condições iniciais produzem diferentes perfis de relaxação, mas o escalamento com o tamanho do sistema N permanece comparável. Também checamos distribuições de coordenadas não-homogêneas como condições iniciais, principalmente ($\theta_0 = 0.3, \ \delta\theta = 0.05$) e obtivemos resultados similares aos conseguidos com as distribuições homogêneas. Embora o valor da temperatura no estado meta-estável não é tão baixo quanto no caso homogêneo, aparecem também neste caso platôs quase-estacionários de longa duração (muito parecidos aos que aparecem no caso $\alpha = 0$ do modelo α -XY, também conhecido como Hamiltoniano de campo médio (HMF, em inglês), no caso de magnetização inicial M = 1 [96]). Voltando às condições iniciais com coordenadas não-homogêneas, a duração dos platôs têm um escalamento com N qualitativamente similar ao caso homogêneo. Neste trabalho escolhemos um conjunto de condições iniciais que facilitaram a posterior análise já que neste caso em particular a relaxação tem só um ponto de inflexão.

Na Fig. 3.7 mostramos a evolução da temperatura para os casos $\alpha = 0.6$ e $\alpha = 2$ e para diferentes valores do tamanho do sistema $N = 10^2, 4 \times 10^2, 10^3, 4 \times 10^2$. As quatro



Figura 3.7: Figura superior: Evolução da temperatura para $\alpha = 2$ e $\alpha = 0.6$ e quatro tamanhos do sistema $N = 10^2, 4 \times 10^2, 10^3, 4 \times 10^2$. As condições iniciais correspondem a $\theta_0 = 0.5, \delta \theta = 0.5,$ $p_0 = 0.3$ e $\delta p = 0.05$. Os parâmetros fixos são a = 0.05 e b = 2. Para $\alpha = 2$ as quatro curvas coincidem quase completamente, todas com uma relaxação muito rápida a T_{BG} . Para $\alpha = 0.6$ mostramos os mesmos tamanhos, em ordem crescente na direção da seta. Figura inferior esquerda: tempo de crossover t_c em função do tamanho N, mostrando uma dependência tipo lei de potência $t_c \sim N^{\beta(\alpha)} \operatorname{com} \beta(\alpha) \geq 0$. Figura inferior direita: $\beta(\alpha)$ em função de α , onde se verifica que para interação de longo alcance a duração dos estados quase-estacionários divergem no limite termodinâmico. Notamos que quando $\alpha = 0, \beta = 1$, e então $t_c \propto N$.

curvas que marcadas pela seta correspondem ao caso $\alpha = 0.6$. O tempo em que ocorre a relaxação é proporcional ao tamanho, sendo então a primeira, da esquerda para a direita, o caso N = 100. As quatro curvas que correspondem a $\alpha = 2$ relaxam aproximadamente ao mesmo tempo, de maneira que parecem uma curva só. Para $\alpha = 0.6$ obtém-se uma típica relaxação em dois passos. Definimos o tempo de *crossover*, t_c , de um estado quaseestacionário ao estado de equilíbrio final BG como o tempo no qual se produz o ponto de inflexão da temperatura dinâmica, ou seja, o tempo no qual a derivada temporal de T(t) é máxima. A dependência de t_c com N para esta eleição de parâmetros e condições iniciais mostra-se na figura inferior esquerda de 3.7. O tempo de *crossover* possui uma lei de escalamento $t_c \sim N^{\beta(\alpha)} \forall \alpha$. Para $\alpha \geq 1$, $\beta(\alpha) \approx 0$ e portanto t_c permanece constante (como mostra o caso $\alpha = 2$ na Fig. 3.7). Para $\alpha \leq 1$, $\beta(\alpha) > 0$, ou seja t_c diverge no limite termodinâmico $N \to \infty$. Este resultado indica que, para interações de longo alcance, os limites $t \to \infty N \to \infty$ e $N \to \infty t \to \infty$ não são equivalentes, e mostra que estes estados quase-estacionários tornam-se permanentes (e portanto, relevantes) quando $N \to \infty$. Novamente, a mesma situação se encontra no modelo α -XY [85].

Finalmente, estudamos a dependência de t_c com o parâmetro a para diferentes valores de α , fixando o parâmetro de acoplamento b = 2 e o tamanho N = 100. Neste caso, assim como nas outras situações analisadas ao longo do capítulo, comportamentos muito diferentes se obtiveram para interações de curto e longo alcance. Para $\alpha > 1$, o valor de t_c , no limite $a \rightarrow 0$, tende a um valor finito. A situação é diferente no caso de longo alcance onde, para $\alpha \ll 1$, o tempo de crossover t_c tem um escalamento tipo $t_c = d(\alpha) a^{1.84}$ sendo $d(\alpha)$ uma função não-linear. Cálculos preliminares mostram que o afastamento para o caso $\alpha = 0.9$ para $a \ll 1$ é devido a efeitos de tamanho finito. Esta lei de escalamento põe em evidência que para interações de longo alcance e o valor do parâmetro não-linear a tende a zero, o tempo t_c diverge, ou seja, o sistema permanece no estado meta-estável indefinidamente.



Figura 3.8: Dependência da temperatura com a. Constantes fixas são $N = 100, p_0 = 0.3, \delta p = 0.05$ e b = 2. Fizemos médias de 100 realizações.

3.5.1 Confinamento no espaço de fases

O estudo de realizações únicas tem mostrado estruturas interessantes no relaxamento ao equilíbrio. Na Fig. 3.9 (acima), mostramos a evolução da temperatura para valores típicos dos parâmetros do sistema.

O resultado sugere que ocupação do espaço de fases μ (o espaço de fases de um mapa) é feita por etapas, onde o sistema permanece certo tempo Δt com uma temperatura Te depois passa a ocupar um volume maior do espaço, onde novamente permanece certo tempo e assim sucessivamente. Note-se que, embora a análise só descreve o que acontece no espaço μ , também reflete indiretamente a evolução do sistema no espaço Γ .

Na Fig. 3.9 (abaixo) apresentamos outra situação, também para uma única realização. Pode-se ver que a temperatura permanece confinada em uma região (estreita) do espaço de fases e, abruptamente, passa a ter uma ocupação maior. O comportamento do MCL indica que a sensibilidade às condições iniciais na primeira região é diferente (menor) ao valor de equilíbrio, também apresentando uma variação brusca quando o sistema sai do confinamento inicial.

Estes resultados indicam a possibilidade de que as relaxações de dois passos características destes sistemas possam ser conseqüência de confinamento das realizações individuais. Mais precisamente, se cada realização tem tempos diferentes de escape do confinamento no espaço de fases, a média mostrará uma relaxação contínua equivalente à estudada usualmente. Mas o estudo detalhado de como se produz esta ocupação por etapas pode ser importante para esclarecer a dinâmica de muitos corpos em sistemas discretos. A pesquisa futura deve focar no estudo sistemático dos tempos $\Delta t(T)$, e sua relação com os parâmetros do sistema e as inferências que possam se fazer em relação à dinâmica no espaço Γ de fases no contexto da mecânica estatística não-extensiva.



Figura 3.9: Acima, temperatura em função do tempo para uma *única* realização individual. Os parâmetros da realização são: N = 100, $\alpha = 0.6$, a = 0.005, b = 2 com condições iniciais definidas por $p_0 - 0.3$ e $\delta p = 0.005$. Abaixo, temperatura e máximo coeficiente de Lyapunov em função do tempo para uma realização individual. As duas quantidades permanecem quase-estacionárias até o sistema se "liberar" e relaxar ao equilíbrio, próximo ao tempo $t = 4 \times 10^5$.

Capítulo 4

Sistemas conservativos contínuos

Neste capítulo estudaremos um sistema arquetípico conservativo de longo alcance, o Hamiltoniano de campo médio. Sabe-se que, que a evolução deste sistema apresenta, como no modelo introduzido no capítulo anterior, estados meta-estáveis de longa duração. Analisamos as funções de densidade de probabilidade dos ângulos dos rotores assim como sua difusão [69]. A partir desta perspectiva, discutimos a relaxação ao equilíbrio e mostramos que o movimento difusivo nas trajetórias dos estados quase-estacionários dependem fortemente do tamanho do sistema. Em uma segunda parte do capítulo, apresentaremos indicações relativas ao princípio zero da termodinâmica nos estados quase-estacionários. Finalmente discutimos a possibilidade de medir a temperatura destes estados fora de equilíbrio usando um termômetro cujos elementos têm interações de curto alcance.

4.1 Sistemas Hamiltonianos com interações de longo alcance

As propriedades de sistemas com interações de longo alcance (sistemas gravitacionais, sistemas Coulombianos, sistemas dipolares, fracturas, sistemas finitos) ainda permanecem sem ser esclarecidas completamente, embora este tipo de sistemas seja muito importante pela variedade de fenômenos que representam. O principal desafio é a construção de uma termodinâmica que descreva corretamente estes sistemas e consiga explicar as similaridades e diferenças dentro da mesma classe de sistemas de longo alcance. Este é um dos pontos de maior interesse dentro do formalismo da mecânica estatística não-extensiva, que tenta combinar as ferramentas estatísticas com uma abordagem fundamentalmente dinâmica. Algumas das características muito interessantes deste tipo de sistema são, inequivalencia de ensemble microcanônico e canônico (associada a calor específico negativo), estados quase-estacionários com temperaturas diferentes à esperada (como vimos no capítulo anterior para sistemas discretos) entre muitas outras. A formulação de um formalismo que possa descrever este tipo de sistemas é de fundamental importância e, portanto, é de grande interesse estudar modelos simples que conservem as características. Um desses modelos é o Hamiltoniano de Campo Médio (HCM), um sistema formado por rotores clássicos planares, com variável dinâmica ângular θ e momento angular conjugado p (onde assumimos momento de inercia únitario). Este modelo é uma versão inercial do modelo ferromagnético XY de spins e será detalhado a seguir.

4.2 Difusão anômala e distribuições não-Gaussianas no modelo HCM

No contexto da teoria de transportes, o fenómeno de difusão tem sido mais largamente estudado desde o final da década de 60 e tem atraído a atenção de muitos pesquisadores nos últimos anos graças a sua universalidade na natureza.

Em particular, ela joga um papel fundamental na análise de uma grande classe de sistemas tais como difusão em plasma [99], difusão em fluidos turbulentos [100, 101], transporte de fluidos em meios porosos [102], difusão em fractais [103], difusão anômala em superfícies líquidas [104], análise de histogramas de batidas do coração em indivíduos saudáveis [105] e no estudo da energia vibracional em proteínas [106], entre outros sistemas físicos.

Por outro lado, como vimos no capítulo anterior, sistemas com interações de longo alcance constituem um tema de pesquisa muito interessante porque freqüentemente exibem uma variedade de características dinâmicas e termodinâmicas muito diferentes em relação aos sistemas com interações de curto alcance (ver [107] para uma revisão deste tema). Um modelo interessante que oferece a possibilidade de investigar alguns dos pontos relacionados com interações de longo alcance é o modelo HCM [81, 83, 84, 89, 85, 86].

Este modelo consiste em N rotores clássicos definidos no plano, interagindo através de um acoplamento de alcance infinito e portanto igual para todos os rotores (campo médio). As variáveis dinâmicas de cada rotor i são o ângulo θ_i e seu momento conjugado p_i . Sem perda de generalidade, os momentos de inércia se consideram igual à unidade. Seu Hamiltoniano é

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} p_i + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^{N} \left[1 - \cos(\theta_i - \theta_j) \right].$$
(4.1)

O modelo pode ser interpretado como uma versão do modelo ferromagnético XY com uma dinâmica newtoniana própria. Embora aqui o alcance das interações seja infinito, tem se demonstrado que o HCM se comporta qualitativamente, em muitos aspectos, como os modelos análogos com interações de longo alcance (finito) [85].

Por esta razão, ainda simples, reflete muitas das características de sistemas reais com interações de longo alcance tais como galáxias e gases de plasma [107].

O equilíbrio termodinâmico deste modelo pode ser resolvido no ensemble canônico. Apresenta uma transição ferromagnética de segunda ordem, desde uma fase de agrupamento a baixas energias até uma fase homogênea de altas energias. A transição ocorre na temperatura crítica $T_c = 0.5$ e energia específica crítica $e_c = 0.75$ [80].

Porém, para certas classes de condições iniciais, se sabe que o sistema pode ficar preso em estados onde as quantidades macroscópicas médias permanecem aproximadamente constantes por longos períodos de tempo com valores diferentes aos esperados no equilíbrio. Isto acontece, por exemplo, numa classe de condições iniciais muito usadas na literatura [80, 96], chamada de *waterbag*. Este tipo de condições iniciais consiste em $\theta_i = \theta_0, \forall i = 1...N$ (ou seja alinhados e onde, sem perda de generalidade, $\theta_0 = 0$) e momentos tomados aleatoriamente de uma distribuição uniforme apropriada, $\{p_i\} \in [-c, c], \forall i$, onde c é uma constante. A constante c é definida através do Hamiltoniano (4.1), fixando a energia específica $H(p_i, \theta_i) = \sum_i p_i^2/2 = Ne$. Adicionalmente, o conjunto dos momentos é deslocado para satisfazer $P = \sum_i p_i = 0$, e eliminar o movimento balístico do centro de massa do sistema.

Por exemplo, usando condições iniciais tipo *waterbag*, se sabe que aparecem estados quase-estacionários para valores da energia especifica do sistema levemente inferiores a e_c [108]. Em um estado quase-estacionário, a temperatura,

$$T = \frac{\langle 2K \rangle}{N} = \frac{1}{N} \sum_{i} p_i^2, \qquad (4.2)$$

onde $\langle . \rangle$ significa médias entre rotores, é quase constante no tempo e menor do que o valor do equilíbrio, $T_{EQE} < T_{BG}$ (note-se que este resultado, não-comutatividade dos limites $N \rightarrow \infty t \rightarrow \infty$ é similar ao apresentado no capítulo anterior para o sistema de mapas globalmente acoplados). Além disso, a duração t_{EQE} dos estados quase-estacionários aumenta com o tamanho do sistema N, indicando que são relevantes no limite termodinâmico ($t_{EQE} \rightarrow \infty$ quando $N \rightarrow \infty$). Neste caso, no estado quase-estacionário, o valor da temperatura tende para um valor fixo ($T_{EQE} \rightarrow T_{inf}$ quando $N \rightarrow \infty$).

Neste trabalho (incluindo os resultados do próximo capítulo) usaremos uma variante das distribuições tipo waterbag, que chamaremos de modificadas, onde os momentos são definidos por $p_i = \frac{c}{N}i + \eta$ onde η é um termo de ruído de ordem $o(\frac{c}{N})$. A eleição dos ângulos é a mesma ($\{\theta_i\} = 0, \forall i$). Esta eleição particular de condições iniciais preservam os mesmos resultados anômalos que as condições iniciais totalmente aleatórias, com a diferença de que os valores dos observáveis (temperatura, magnetização, etc) são mais próximos aos encontrados quando o tamanho do sistema é grande ($N \gg 1$). Por exemplo, para uma dado N, a temperatura do estado quase-estacionário T_{EQE} é ainda mais baixa, de alguma maneira "imitando" sistemas maiores [120].

Outras características anômalas tem se encontrado para estas condições iniciais de nãoequilíbrio, como por exemplo: distribuições de momentos não-maxwelliana [108], dinâmica tipo vidro [109], envelhecimento [110, 111], difusão anômala [112], entre outras.

Em particular, a difusão anômala tem se associado aos estados quase-estacionários [112] e depois à relaxação (não-estacionária) ao equilíbrio [116]. Neste capítulo mostramos re-



Figura 4.1: Temperatura em função do tempo para condições iniciais tipo waterbag usual (em linha pontilhada) e a variação usada no presente trabalho (em linha cheia). Na figura inserida podemos ver que os dois tipos de condições iniciais levam a estados quase-estacionários, mas no caso das condições iniciais aqui utilizadas a temperatura é menor (na figura, T_{EQE} corresponde as condições iniciais deste trabalho e T'_{EQE} as usadas na literatura, por exemplo, em [133]). No limite termodinâmico as duas temperaturas convergem a T_{inf} .

sultados novos na difusão anômala e na relaxação ao equilíbrio, focando na dependência com o número de elementos do sistema N.

As equações de movimento derivadas do Hamiltoniano (4.1) são,

$$\dot{\theta}_i = p_i, \quad \text{for } 1 \le i \le N$$

$$(4.3)$$

$$\dot{p}_i = M_y \cos \theta_i - M_x \sin \theta_i, \tag{4.4}$$

onde $\vec{M} = \frac{1}{N} \sum_{j} (\cos \theta_j, \sin \theta_j)$ é a magnetização. Resolvemos numericamente estas equações usando um algoritmo simplético de quarta ordem [118]. A integração foi feita para valor fixo da energia específica e = 0.69, para a qual os efeitos quase-estacionários são mais evidentes.

Consideramos duas classes de condições iniciais. O primeiro tipo foi discutido antes, ou seja, condições iniciais tipo *waterbag* modificadas. Realizamos também simulações para condições iniciais de equilíbrio. Para isto procedemos da seguinte maneira. Da solução canônica analítica de BG, se sabe que a distribuição de equilíbrio para os ângulos [120] é dada por

$$f(\theta) = \frac{1}{2\pi I_0(\beta m)} \exp \beta m \cos(\theta), \qquad (4.5)$$

onde β é a inversa da temperatura, m é a magnetização específica, e I_0 é a função modificada de Bessel de primeira espécie de ordem 1. Note-se que esta distribuição é a solução para $\theta \in [0, 2\pi)$. A distribuição de momentos está dada, como esperado, por uma função Gaussiana. Usando coordenadas iniciais pertencentes a estas distribuições, esperamos um tempo transiente apropriado para permitir qualquer eventual relaxação posterior. As coordenadas no final deste tempo transiente são colhidas para fazer o papel de condições iniciais de equilíbrio.

A integração das equações (4.3) e (4.4) originam ângulos em $(-\infty, \infty)$. Calculamos os histogramas dos ângulos para diferentes tempos, realizando médias em várias realizações estatisticamente diferentes para diminuir as flutuações estatísticas. A dinâmica só depende dos ângulos tomando o módulo 2π , já que a dependência nas equações de movimento é no argumento das funções trigonométricas seno e coseno. Porém, a estatística dos ângulos sem o módulo é relevante porque reflete as características do espaço de fases que, como foi discutido, apresenta anomalias. Em particular, a equação de Kubo [116] vincula a variância dos ângulos com a função de correlação dos momentos, o que motiva o interesse em compreender a estatística dos ângulos.

4.2.1 Funções de densidade de probabilidade de ângulos

Para baixas energias, os ângulos apresentam uma fase de agrupamento, ficando confinados a um intervalo finito no suporte. Para energias suficientemente altas, evoluem com movimento difusivo. Na Fig. 4.2 mostramos a função de densidade de probabilidade (com o escalamento adequado) para ângulos dos rotores em diferentes tempos, e tamanho fixo do sistema $N = 10^3$ e energia específica e = 0.69, usando condições iniciais tipo waterbag modificadas. Depois de um breve transiente (que coincide com a relaxação rápida de T), os histogramas numéricos podem ser notavelmente bem descritos em todo o intervalo por funções q-Gaussianas [2] (introduzida na Eq. 1.13).

$$P(\theta) = A \left(1 + (q-1)(\theta/\beta)^2 \right)^{\frac{1}{1-q}} , \qquad (4.6)$$

onde A é o fator de normalização e β é uma constante positiva. Como discutimos anteriormente, esta função inclui a distribuição Gaussiana quando $q \rightarrow 1$ e apresenta caudas tipo lei de potência quando q > 1. Lembrando que a função de densidade de probabilidade (4.6) tem variância $\sigma^2 = \beta^2/(5 - 3q)$, para q < 5/3, e considerando ângulos normalizados $\phi = \theta/\sigma$, então a Eq. (4.6) pode ser reescrita como uma função com um único parâmetro,

$$P_q(\phi) = A_q \left(1 + \frac{q-1}{5-3q} \phi^2 \right)^{\frac{1}{1-q}},$$
(4.7)

onde $A_q = \sqrt{\frac{q-1}{\pi(5-3q)}} \frac{\Gamma(1/(q-1))}{\Gamma(1/(q-1)-1/2)}.$

A cada instante t
 da dinâmica, calculamos a variância σ^2 como

$$\sigma^2(t) = \langle (\theta - \langle \theta \rangle_t)^2 \rangle_t, \tag{4.8}$$

onde $\langle ... \rangle_t$ significa médias tanto entre os N rotores quanto nas diferentes realizações no tempo t.

Na Fig. 4.3 exibimos a evolução temporal da temperatura $T(t) = \sum_i \langle p_i^2 \rangle / N$ (a) e o desvio padrão $\sigma(t)$ (b), para estabelecer um paralelo entre os distintos regimes destas quantidades. A figura (c) será abordada mais adiante. Em (d), mostra-se a evolução de qpara os diferentes N, incluindo os valores dos ajustes usados na Fig. 4.2 para $N = 10^3$. O parâmetro q cresce até um valor estacionário no limite de tempos longos, que para todos os N encontra-se dentro do intervalo $q \simeq 1.51 \pm 0.02$. Pode-se ver que q atinge um valor estacionário aproximadamente quando se produz a transição do estado quase-estacionário ao equilíbrio. Na Fig. 4.4 apresentamos os mesmos dados como o escalamento apropriado de tempo $(N^{1.7})$ que colapsa a relaxação ao equilíbrio.

Na Fig. 4.5 mostramos as funções de densidade de probabilidade dos ângulos dos rotores, para $N = 5 \times 10^2$, e e = 0.69, porém começando com uma configuração de equilíbrio. Neste caso, os histogramas apresentam "ombros" pronunciados que persistem por tempos longos e que não podem ser bem descritos por q-Gaussianas. Mas, à medida que o tempo passa, estes ombros afastam-se do centro e os histogramas tendem a uma função q-Gaussiana, com $q \simeq 3/2$ no limite de tempos longos.

Portanto, nossos resultados mostram que começando com condições iniciais de ângulos inicialmente confinadas, seja desde uma configuração de equilíbrio ou desde uma de não-equilíbrio, estas densidades desenvolvem caudas tipo lei de potência e adotam distribuições q-Gaussianas.

4.2.2 Difusão anômala e efeitos de tamanho finito

A difusão das coordenadas espaciais pode ser caracterizadas pelo deslocamento médio quadrado $\sigma^2(t)$ dos ângulos θ definido na Eq. (4.8). A relação generalizada de Einstein em uma dimensão é

$$\sigma^2(t) = 2D t^{\gamma}, \qquad (4.9)$$



Figura 4.2: Histogramas dos ângulos dos rotores em diferentes instantes da dinâmica, em símbolos. Simulações para $N = 10^3$ foram realizadas começando com condições iniciais tipo waterbag modificadas com e = 0.69. Foram acumuladas acima de 10^2 realizações, em instantes $t_k = 2^k$, onde k = 6, 8, ...14, crescendo na direção da seta (a última distribuição corresponde a t = 16384. As linhas sólidas correspondem a ajustes usando q-Gaussianas. Os histogramas foram deslocados para melhor visualização. Na figura inserida representamos os dados ajustados em dupla escala logarítmica.



Figura 4.3: Médias das séries temporais, (a) da temperatura T, (b) do desvio padrão σ , (c) do expoente de difusão γ e (d) do parâmetro q, para e = 0.69 e diferentes valores de N ($N = 500 \times 2^k$, onde $k = 0, \ldots, 9$). As linhas cheias correspondem a $N = 5 \times 10^2$, para referência, onde N aumenta na direção das setas até $N = 2.56 \times 10^5$. Fizemos médias em mais de $2.56 \times 10^5/N$ realizações, começando com uma configuração tipo waterbag modificada em t = 0. Na figura (d), o erro do ajuste é aproximadamente 0.03. As linhas pontilhadas são desenhadas como referências. Em (a), correspondem à temperatura de equilíbrio ($T_{BG} = 0.476$) e a estados quase-estacionários no limite termodinâmico ($T_{EQE} = 0.38$). Em (b) e (c), a movimento balístico ($\gamma = 2$) e difusão normal ($\gamma = 1$). Em (d) a q = 1 (Gaussiana) e q = 1.5



Figura 4.4: Médias das séries temporais das seguintes quantidades: (a) temperatura T, (b) expoente local γ e parâmetro q (símbolos), em função de $t/N^{1.7}$. Os dados são os mesmos apresentados na Fig. 4.3.

onde D é a constante de difusão. O caso $\gamma = 1$ corresponde a difusão normal, $\gamma < 1$ e sub-difusão e superdifusão ocorre para $\gamma > 1$. A evolução de σ mostra-se nas Figs. 4.3 (b) e 4.6 (b), para condições iniciais tipo *water-bag* e de equilíbrio, respectivamente. Para possibilitar o reconhecimento dos diferentes regimes, é útil calcular o expoente instantâneo γ em função do tempo, tomando o logaritmo nos dois lados da Eq. (4.9) e diferenciando



Figura 4.5: Histogramas dos ângulos dos rotores em diferentes instantes da dinâmica (símbolos). As simulações foram realizadas para N = 500 e e = 0.69, começando com condições iniciais de equilíbrio. Acumulamos 200 realizações para os tempos $t_k = 0.1 \times 4^k$, k = 3, 4, ..10, crescendo na direção da seta até $t \simeq 1.05 \times 10^5$. A função q-Gaussiana com q = 1.53 foi desenhada para comparação (linha cheia). Os histogramas foram deslocados para visualização.

em relação a $\ln t$:

$$\gamma(t) = \frac{d(\ln \sigma^2)}{d(\ln t)} . \tag{4.10}$$

O resultado deste procedimento pode se ver na Fig. 4.3 (c) para condições iniciais tipo *water-bag.* A mesma análise se apresenta na Fig. 4.6 (c) para sistemas preparados numa configuração de equilíbrio.

Como se mostra na Fig. 4.6 (ver também [116]) para esta última classe de condições iniciais, o movimento dos ângulos é balístico ($\gamma = 2$) em tempos curtos onde os rotores se movem quase livres, enquanto que a difusão é normal ($\gamma = 1$) no limite de tempos longos.



Figura 4.6: Séries temporais das seguintes quantidades: (a) temperatura T, (b) desvio padrão σ e (c) expoente de difusão γ , para N = 500 e e = 0.69. Em t = 0, o sistema está na configuração de *equilíbrio*. Mostra-se o resultado de uma única realização.

O tempo de *crossover* entre os dois tipos de comportamentos desloca-se em direção a tempos grandes quando N cresce. Este comportamento também foi observado para valores supercríticos de energias (e = 5), embora na Ref. [112] exibe-se só o regime balístico já que a difusão é normal para tempos maiores que aqueles analisados nesse trabalho.

Para condições iniciais tipo *water-bag*, os dois regimes, normal e balístico, observamse para tempos curtos e longos, respectivamente. Porém, neste caso, a relaxação é mais complexa (ver Figs. 4.3 (c) e 4.4 (c)): Podemos considerar um terceiro regime intermédio onde o expoente γ muda não-monotonicamente começando com valores superdifusivos e sem apresentar um platô bem definido como o da temperatura.

Para este regime intermédio, tem se afirmado a existência de superdifusão atribuída a um mecanismo tipo vôo de Lévy que produz uma sucessão de caminhadas aleatórias e "eventos de captura" da trajetória dos ângulos individuais [112]. Finalmente, este regime também tem-se interpretado desde um ponto de vista topológico [122].

As principais características que observam-se na evolução do expoente local γ podem ser resumidas assim:

- i) Num primeiro regime, γ toma um valor máximo que permanece próximo a γ = 2, e que corresponde a movimento balístico. Este regime acontece no começo do estado quase-estacionário e sua duração cresce quando N aumenta.
- ii) Posteriormente γ alcança um valor mínimo que, à medida que N aumenta, coincide com o intervalo onde se produz o estado quase-estacionário. Também quando N aumenta, a largura deste mínimo se incrementa e vira quase constante, tendendo à unidade (ver Fig. 4.4). Portanto, a difusão anômala no estado quase-estacionário parece ser um efeito de tamanho finito [121].
- iii) Outro máximo aparece em correspondência com o regime intermédio de relaxação rápida do estado quase-estacionário ao equilíbrio. Este máximo cresce em altura com N, superando o valor $\gamma = 2$ e se estreita, tendo menos duração. O máximo corresponde aproximadamente ao ponto de inflexão na evolução da temperatura,

cuja pendente aumenta com N como se observa nas Figs. 4.3 e 4.4. De fato, na relaxação desde o estado quase-estacionário ao equilíbrio, o rápido incremento de T (energia cinética) leva a um aumento acelerado das médias dos ângulos.

iv) No regime final, γ relaxa assintoticamente à unidade, indicando difusão normal para tempos muito longos.

4.2.3 Discussão

Assumindo a validade da relação generalizada de Einstein em uma dimensão (Eq. 4.9) podemos concluir, da análise da evolução do expoente γ , que o tipo de difusão nos estados quase-estacionários dependem fortemente do tamanho do sistema. Em particular, mostramos que, quando N aumenta, a região de $\gamma(t)$ que corresponde com o mínimo da temperatura T_{EQE} no estado quase-estacionário, vira progressivamente mais plano, definindo também um valor quase-estacionário para o mesmo γ . Nosso resultado indica que este valor meta-estável do γ tende para a unidade no limite termodinâmico. Em conclusão, a difusão ao redor do mínimo do estado quase-estacionário (no limite termodinâmico) não é anômala, senão normal. Quando $N \gg 1$, analisando o intervalo de tempo completo, desde o inicio fora de equilíbrio até a relaxação final ao equilíbrio de BG, observamos que só aparecem valores não triviais de γ no transiente inicial e no intervalo de tempo do relaxamento, onde o sistema sai de do estado meta-estável e relaxa ao equilíbrio. Isto é consistente com resultados recentes na literatura [116]. Além disto, quando o sistema esta inicialmente com os ângulos confinados, como acontece nas condições iniciais usadas em nosso trabalho, o monitoramento da evolução dos ângulos indica que as distribuições desenvolvem caudas tipo lei de potência. Para os estados quase-estacionários aqui estudados, as distribuições observadas são q-Gaussianas onde q aumenta desde um valor próximo a q = 1até um valor estável $q \simeq 3/2$, que parece não mudar dentro dos tempos alcançados pelas nossas simulações (que alcançam tempos onde a temperatura já atingiu o valor de T_{BG}). Este valor estável também é observado assintoticamente quando começa-se com valores de momentos e ângulos de equilíbrio (ou seja, tomando coordenadas iniciais de distribuições

de equilíbrio determinadas analiticamente pelo formalismo de BG).

Este resultado é, com certeza, muito intrigante. Por que é que se desenvolvem q-Gaussianas, relacionadas sempre com a mecânica estatística não-extensiva, no estado do equilíbrio de BG? Ainda não se tem compreensão total deste ponto, mas podemos aqui adiantar uma possível explicação. Sabe-se que a generalização da equação de difusão normal (onde se substituem das derivadas espaciais por fracionarias) tem como resultado funções de Lévy (note-se que não é nosso caso já que para isso teríamos de ter segundo momento infinito, ou seja q > 5/3, e isto não é observado). Mas a seguinte equação de difusão generalizada não-linear $\partial_t P(x,t) = D \partial_{xx} [P(x,t)]^{2-q}$, onde D e q são constantes, tem como soluções a tempos longos a q-Gaussianas [123]. A relação entre o expoente de difusão γ com o índice q que surge desta equação de difusão é $\gamma = 2/(3-q)$. Embora neste caso observa-se um índice q que muda no tempo, o fato de atingir um valor estável sugere que a dispersão dos ângulos pode estar governada por um processo similar. Nesse caso, o expoente de difusão efetivo seria $\gamma_{eff} \approx 4/3$. Portanto, o que pode estar acontecendo é que o processo não-estacionário de relaxação, onde o γ atinge valores não triviais pode estar dando lugar a distribuições q-Gaussianas. Por outro lado, temos confirmado em cálculos preliminares [184] que, para uma equação de difusão normal, uma distribuição inicial q-Gaussiana vai evoluindo na direção de uma Gaussiana (q=1) começando pelo centro da distribuição. Eventualmente, as caudas relaxam a uma Gaussiana, mas durante todo o processo mantém a mesma dependência tipo lei de potência (sempre com o mesmo q). Com efeito, a relaxação para Gaussianas parece ser proporcional à variância. Em conseqüência, e voltando a nosso resultado no HCM, como nos tempos que correspondem à relaxação ao equilíbrio, a variância σ é muito grande, os tempos necessários para observar Gaussianas são ainda *muito maiores*, fora do observável no nosso experimento numérico. O esclarecimento desta questão está em andamento.

4.3 O princípio zero da termodinâmica em estados quase-estacionários

Nesta seção mostramos indicações de que o princípio zero da termodinâmica pode se aplicar aos estados quase-estacionários do Hamiltoniano 4.1 [71].

O princípio zero da termodinâmica pode ser formulado da seguinte maneira: Se os sistemas $A \in B$ estão em equilíbrio térmico com C, então estão em equilíbrio térmico entre eles. Este princípio é um dos princípios básicos da física termodinâmica. Estabelece a transitividade da temperatura, e é de fundamental importância, sendo essencial na formulação lógica da termodinâmica. Em particular, é essencial na termometria, a qual reside nos fundamentos da física experimental.

Como indicam numerosos resultados computacionais [40, 41, 66], no limite termodinâmico $N \to \infty$, os estados quase-estacionários duram indefinidamente. Para fazer uma descrição termodinâmica deste estado, é fundamental o estudo do princípio zero sob estas condições. Mais concretamente, é importante conhecer qual é o comportamento de um termômetro que teste este estado quase-estacionário.

Para investigar este importante tema, realizamos duas experiências numéricas que permitem elaborar um panorama da situação. Em todas as simulações, integramos numericamente as equações de Hamilton (4.3) e (4.4), usando o integrador simplético de quarta ordem de Neri-Yoshida [118] com uma conservação da energia de $\Delta E/E \simeq 10^{-4}$ nas diferentes configurações.

4.3.1 Relaxação da temperatura dinâmica do ensemble canônico fora do equilíbrio

Na nossa primeira simulação examinamos a construção padrão do ensemble canônico, definida como um subconjunto do ensemble microcanônico (muito maior) que atua como um termostato. A partir do conjunto dos N rotores isolados, consideramos dois subconjuntos diferentes deste sistema, cada um de M rotores, onde $M \ll N$. O primeiro (segundo) subsistema é composto pelos rotores com maior (menor) energia inicial, de modo que a temperatura inicial

$$T_M(0) = \frac{2K_M(0)}{M}$$
(4.11)

é maior (menor) que a do conjunto isolado total

$$T_N(0) = \frac{2K_N(0)}{N}.$$
(4.12)

Chamaremos estas duas configurações iniciais de subsistema *quente* e subsistema *frio*, respectivamente. Realizamos estas configurações para valores de M = 100,500,1000 com o objetivo de estudar efeitos de tamanho finito.

A Fig. 4.7 mostra o resultado de uma única (típica) simulação, onde $N = 10^4$. Nos dois casos observa-se que T_M relaxa depois de certo tempo a T_N , enquanto o sistema isolado ainda se encontra no estado quase-estacionário. Esta situação se mantém até que todos os sistemas relaxam (juntos) a T_{BG} . É importante observar que o subsistema que começa de uma temperatura maior, atravessa a T_{BG} quando relaxa à temperatura do estado quase-estacionário sem sinais de relaxar à própria T_{BG} . Este resultado, para o quaseestacionário, concorda precisamente com o princípio zero da termodinâmica de equilíbrio. De fato, dois sistemas estão em (meta)equilíbrio térmico com um terceiro sistema, e em (meta)equilíbrio térmico entre eles. Esta verificação abre a possibilidade de um tratamento canônico generalizado do estado quase-estacionário, já que todos os subsistemas com $M \ll$ N compartilham a mesma temperatura depois do transiente inicial. Discutimos as possíveis implicações deste estudo na próxima seção.

4.3.2 Relaxação da temperatura dinâmica de um sistema BG em contato com um sistema não-extensivo

Nosso segundo resultado em relação aos estados quase-estacionários, aborda a questão da possibilidade de medir a temperatura dinâmica no estado quase-estacionário [71, 70]. Fazemos isto considerando o sistema (4.1) como se fosse um *termostato* e construindo um



Figura 4.7: Evolução temporal de um sistema isolado de N rotores (Eq. (4.1)) em linha cinza, e subsistemas de M = 100,500,1000 rotores *frios* e *quentes*. Na figura inserida, uma ampliação da transição entre T_{EQE} e T_{BG} .

termômetro (diferente do sistema (4.1)) que satisfaz as leis usuais de BG. Mais concretamente, escolhemos interações de *curto alcance* para o termômetro, tanto para a dinâmica dos elementos que o compõem quanto para as interações com o termostato. O termômetro está, então, composto por M rotores clássicos cujo Hamiltoniano é

$$H_{term\hat{o}metro} = \sum_{j=1}^{M} \frac{p_j^2}{2} + \sum_{j=1}^{M} \left[1 - \cos(\theta_j - \theta_{j+1}) \right].$$
(4.13)

O termo de potencial é igual ao do termostato, mas só existe interação entre primeiros vizinhos. Esta interação de curto alcance resulta em um sistema típico de BG.

O termômetro é preparado com o seguinte procedimento. Antes de entrar em contato

com o termostato, escolhemos como coordenadas iniciais do termômetro os ângulos $\theta_j = 0$ $\forall j$, alinhados como nas condições iniciais descritas anteriormente, mas os momentos p_j pertencentes a uma distribuição Gaussiana cujo desvio padrão é função da temperatura inicial (da nossa eleição). Depois deixamos evoluir o sistema livremente para tempos suficientemente longos de maneira de alcançar completamente o equilíbrio de BG, caracterizado por uma distribuição marginal de velocidades Maxwelliana. As 2*M* coordenadas definidas por esta evolução dinâmica são consideradas como condições iniciais para a sucessiva evolução em contato com o termostato. Desta maneira o termômetro começa no equilíbrio usual de BG.

Por outro lado, o termostato é preparado com condições iniciais tipo waterbag modificadas. Deixamos evoluir os dois sistemas separadamente, até deixar passar qualquer breve transiente. Em um tempo conveniente $t_{contato}$, os dois sistemas são conectados através do termo de interação

$$H_{int} = c \sum_{j=1}^{M} \left[1 - \cos(\theta_j - \theta_{\xi(j)}) \right],$$
(4.14)

onde $\xi(i)$ é um número natural aleatório entre 1 e N (fixo para o resto da simulação) que descreve a conexão entre os rotores do termômetro e do termostato. Incluímos também uma constante c para regular a intensidade do termo de interação (a constante de acoplamento dos rotores de cada sistema e considerada igual à unidade). Se chamamos $H_{termosato}$ ao Hamiltoniano (4.1), o sistema em conjunto, depois de $t_{contato}$, é descrito pelo seguinte Hamiltoniano,

$$H = H_{termostato} + H_{termômetro} + H_{int}.$$
(4.15)

Na Fig. 4.8 mostra-se os resultados de uma única simulação típica com $N=10^5,$ M=50 e $c=5\times 10^{-2}.$

Um fator importante é considerar apropriadamente a ordem de grandeza da constante de acoplamento c. De fato, por um lado temos como objetivo estabelecer um acoplamento significativo entre os sistemas, mas por outro não é conveniente produzir uma perturbação grande demais ao termostato (já que na prática, ele não pode ter o tamanho infinito de um *verdadeiro* termostato). Portanto, espera-se que o efeito do valor da constante de



Figura 4.8: Evolução temporal de um termostato de N rotores (Eq. (4.1)) em linha cinza, e de um termômetro de M rotores (Eq. (4.13)) em linha preta. Depois de $t_{contato}$ os os sistemas interagem através de H_{int} . Na figura inserida, mostramos uma ampliação da temperatura do termostato.

acoplamento seja cada vez menos restritivo na medida que nos aproximamos ao limite termodinâmico teórico $(N, M, N/M) \rightarrow (\infty, \infty, \infty)$.

Nossos resultados indicam que a temperatura do termômetro $T_M = 2K_{termômetro}/M$, escolhida com o objeto de começar abaixo da temperatura do termostato (termômetro frio), se mantém alguns passos de tempo na condição inicial de equilíbrio e a continuação cresce rapidamente até chegar na temperatura do termostato $T_N = 2K_{termostato}/N$. O processo de relaxação ocorre completamente dentro do estado quase-estacionário, para $\Delta t \approx 10^5$ passos temporais (obviamente estão presentes flutuações devido ao tamanho finito do sistema). Diferentemente do caso prévio, o termômetro eventualmente começa a relaxar à sua temperatura de equilíbrio *antes* de que o termostato comece sua termalização final. Como abordaremos a continuação, consideramos que este seja mais um efeito de tamanho finito. Notamos, na figura inserida na Fig. 4.8, que o tempo ao qual a temperatura do termômetro deixa de acompanhar a temperatura do termostato coincide aproximadamente com o mínimo desta última, que se sabe é o ponto antes do termostato finalmente relaxar à temperatura final de equilíbrio T_{BG} [40].

Quando o termômetro é preparado de modo a ter, antes do contato, uma temperatura inicial maior do que a temperatura do termostato (termômetro quente), nossos resultados não indicam sinal claro de termalização. A temperatura T_M cresce constantemente até atingir o equilíbrio definitivo. Uma possibilidade é que este efeito desapareça quando sejam possíveis simulações com sistemas ainda maiores, pelo qual seria importante alcançar novos tamanhos do sistema para responder a esta conjectura. É também interessante notar que ainda preparando o termômetro frio, a termalização ocorre só para valores de $N \in N/M$ suficientemente grandes. Por exemplo, simulações com $N = 5 \times 10^5$ e $M = 5 \times 10^2$ não mostram nenhuma termalização.

Considerando o conjunto dos nossos resultados, i) que a temperatura do termômetro alcança o equilíbrio de BG antes do termostato, ii) que não existe relaxação para $T_M > T_N$), no caso em que N e (ou) N/M são muito pequenos), e notando que o termostato tem envelhecimento [110], podemos avançar uma possível explicação: O modelo (4.1) se comporta como se tivesse um mecanismo interno que, depois de certo tempo, para valores de N finitos, afasta o sistema fora do estado quase-estacionário e em conseqüência o sistema relaxa ao equilíbrio estabelecido pelo formalismo de BG. Este mecanismo funciona como um relógio que regula o tempo de termalização e possivelmente funcione como um poço de potencial cuja profundidade decresce com o tempo. Um sistema com flutuações suficientemente grandes, comparadas com esta profundidade, nunca poderá estar confinado ao poço. Um sistema com flutuações suficientemente pequenas vai estar confinado ao poço, mas só por um tempo limitado, até que a profundidade do poço comece ser comparável com as flutuações. Em nosso caso, o efeito do poço pode restringir ao sistema de visitar só uma parte do espaço de fases, enquanto que não estar em nenhum poço estaria associado a visitá-lo completamente, sendo então um sistema ergódico e relaxando à temperatura de equilíbrio de BG esperada (ver [76] para uma analogia de baixa dimensionalidade). Conseqüentemente, se esta conjectura é correta, as flutuações influiriam fortemente na permanência do sistema no estado quase-estacionário. Note-se que este panorama é também consistente com a realização de subconjuntos do sistema isolado como foi observado na Fig. 4.7.

Evidentemente, existem interessantes perspectivas nesta linha de pesquisa. É de fundamental importância que eventualmente seja possível a simulação de sistemas maiores para conseguir distinguir os fatos físicos dos efeitos de tamanho finito. O trabalho aqui indicado, abre a possibilidade de estudar outros tipos de acoplamentos e sistemas, em uma abordagem inteiramente dinâmica. Neste sentido, é uma contribuição à compreensão da conexão entre estatística e dinâmica, crucial para entender as limitações e possibilidades dos diferentes formalismos. No capítulo a seguir abordamos novamente este tema desde outra perspectiva.

Capítulo 5

Fundamentação dinâmica do ensemble canônico de BG

Neste capítulo apresentamos um cálculo numérico que permite uma comparação direta entre uma dinâmica Hamiltoniana e a distribuição canônica de Boltzmann-Gibbs no espaço de fases Γ de Gibbs [68]. Implementamos nosso cálculo em dois modelos paradigmáticos com interação com primeiros vizinhos. Mostramos que, para energias intermediárias, a distribuição de equilíbrio de Boltzmann-Gibbs é uma conseqüência da segunda lei de Newton ($\mathbf{F} = m\mathbf{a}$). Para energias maiores discutiremos a concordância parcial entre médias de *ensembles* e de tempo.

5.1 Introdução

Como mencionamos anteriormente, o problema da fundamentação dinâmica da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs (BG) tem começo na data original da proposta do formalismo (ver, por exemplo, [124]) e, apesar dos numerosos e importantes resultados, esta pergunta fundamental [36] ainda apresenta aspectos básicos em aberto (ver, por exemplo, [126, 127, 128, 130, 131] e referências ali incluídas). Graças às atuais potencialidades computacionais podem-se integrar numericamente as equações de Hamilton de sistemas suficientemente grandes e compará-los com os resultados preditos pelo formalismo de BG. Esta técnica tem sido amplamente implementada, e com notável sucesso, numa perspectiva microcanônica. Porém, os métodos usados, quando se referem a sistemas em contato com um termostato (ou seja, no ensemble canônico, como os métodos de Monte Carlo ou Nosé-Hoover [132]) usualmente impõem uma dinâmica *ad hoc*.

Neste capítulo introduzimos um esquema que permite a discussão da distribuição de energias no espaço Γ de Gibbs, baseado unicamente nas equações de movimento da mecânica clássica. Nesta abordagem tanto as médias de ensemble quanto as de tempo são realizadas dinamicamente, com o objetivo de discutir a ergodicidade do sistema.

Usaremos dois sistemas Hamiltonianos não-lineares paradigmáticos com interações de primeiros vizinhos, o modelo XY ferromagnético em uma dimensão e o modelo β Fermi-Pasta-Ulam (FPU). Encontramos uma importante concordância entre os cálculos de equilíbrio de BG e as médias dinâmicas de ensemble. Também comparamos a falha parcial de ergodicidade e o papel do máximo coeficiente de Lyapunov.

Nosso cálculo numérico pode ser implementado em sistemas que dão lugar a uma definição de ensemble canônico padrão, ou seja uma parte de um sistema isolado. Em princípio, é também possível o mesmo procedimento em sistemas não-extensivos como o HCM, onde devido às interações de longo alcance, existem desvios do esperado pelo formalismo de BG [133, 137, 171, 173]. Esta possibilidade está sendo estudada e será discutida no final do capítulo.

5.2 Cálculo de médias temporais e de ensemble

Dadas certas condições macroscópicas no espaço de fases do sistema considerado (espaço Γ), o valor médio de uma função dinâmica pode ser definido usando médias temporais ou de ensemble. *Ergodicidade* faz referencia à situação onde estes dois métodos são equivalentes.

Note-se que ambos são dinamicamente realizáveis. No primeiro caso foca-se em uma única realização dinâmica. A probabilidade p_R de encontrar o sistema dentro de uma região R do espaço de fases Γ é definida pela fração do tempo t_R que o sistema passa dentro

dessa região durante a quantidade de tempo total τ da trajetória no espaço de fases, que eventualmente pode ser infinita: $p_R^t \equiv t_R/\tau$, onde o superíndice t se refere à definição de média no tempo. A segunda se consegue, por exemplo, fixando um certo instante t^* e repetindo a evolução dinâmica até t^* , sob as mesmas condições iniciais macroscópicas (mas com diferentes condições iniciais microscópicas). Contando o número de realizações n_R que o sistema encontra-se na região R no instante t^* , em relação ao número total de realizações n (que podem ser eventualmente infinitas) definimos $p_R^e \equiv n_R/n$, onde o superíndice eindica médias no ensemble.

Como comentamos anteriormente, para um sistema Hamiltoniano com N elementos que cumpre com as proposições do formalismo de BG, com uma energia fixa E_N (no microcanônico), o ensemble canônico é normalmente introduzido definindo o sistema canônico como um subconjunto do sistema composto por M elementos interagentes, onde $1 \ll$ $M \ll N$. A energia destes M elementos satisfaz $E_M \ll E_N$, e a energia de interação entre o sistema canônico e o resto do sistema isolado (o banho térmico) assume-se como muito menor que E_M . Em estas circunstâncias, a probabilidade p_j de encontrar o sistema de Melementos no microestado j, é dada pelo cálculo no equilíbrio de BG

$$p_j = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_j},\tag{5.1}$$

onde Z é a normalização, $\beta \equiv 1/T$ é a inversa da temperatura (sem perda de generalidade, fazemos a constante de Boltzmann $k_B \equiv 1$), e E_j é a energia do microestado.

A abordagem dinâmica para a confirmação deste resultado tem de enfrentar a seguinte dificuldade numérica. O espaço Γ tem Md dimensões, sendo d a dimensão do espaço de fases de uma única partícula. Se implementamos um "coarse-graining", por exemplo fazendo uma partição de k intervalos em cada coordenada, o número total de (hiper)células Ω_M é da ordem k^{Md} . Só para dar alguns números indicativos, com k = 4, M = 100 e d = 2obtemos $\Omega_M \sim 4^{200} \sim 10^{120}$. Teríamos, então, a tarefa de implementar uma integração numérica de $2N(\gg M = 200)$ equações de Hamilton com número de passos temporais total de τ (ou um número total de realizações n) muito maior do que 10^{120} , que é claramente além do que se pode alcançar numericamente na atualidade. Não obstante, podemos proceder através de um caminho alternativo, em vez de focar na probabilidade associada a um microestado, podemos considerar a probabilidade de encontrar o sistema canônico com uma certa energia E_M . Neste caso a resposta do formalismo de BG é

$$p(E_M) = \frac{\omega(E_M)e^{-\beta E_M}}{Z},$$
(5.2)

onde Z é a função de partição e

$$\omega(E_M) = \int \prod_{i=1}^{M} (dp_i dq_i) \delta[E_M - H_M(p_i, q_i)]$$
(5.3)

é a densidade de estados no espaço de fases com energia E_M . Como se sabe, para sistemas clássicos, $\omega(E_M)$ não depende da estatística particular, mas só do Hamiltoniano do sistema. Em outras palavras, podemos calcular $\omega(E_M)$ usando qualquer estatística, por exemplo a estatística de BG [134]. A densidade de estados $\omega(E_M)$ pode ser analiticamente estimada através da relação termodinâmica que vincula entropia com temperatura: $\partial \ln \omega(E)/\partial E =$ β . Invertendo esta relação temos que $\omega(E_M)$ é dada pela curva calórica T(E):

$$\frac{\omega(E_M)}{\omega(E_0)} = \exp\left[\int_{E_0}^{E_M} dE' \ \beta(E')\right],\tag{5.4}$$

onde E_0 é a energia do estado fundamental. Resumindo, a estrutura Hamiltoniana do sistema define a densidade de estados como uma função da energia. Uma vez que esta relação é conhecida, basta com multiplicar $\omega(E_M)$ pelo fator de Boltzmann $e^{-\beta E_M}$ e normalizar, para obter $p(E_M)$ para uma temperatura arbitrária. Em relação ao cálculo do estado microscópico p_j , o cômputo dinâmico de $p(E_M)$ é muito mais fácil de realizar. Tudo o que tem de se fazer é integrar numericamente as equações de Hamilton e calcular o valor da energia E_M para o subconjunto canônico em cada passo de integração. Podemos, então, fazer o "coarse-graining" do espectro da energia em intervalos pequenos de largura ΔE_M e, medindo a ocorrência de cada um desses intervalos, construir histogramas normalizados. Analogamente à anterior discussão,

$$p^{t}(E_{M}) \equiv \frac{t(E_{M})}{\tau \ \Delta E_{M}} \ e \ p^{e}(E_{M}) \equiv \frac{n(E_{M})}{n \ \Delta E_{M}}$$
(5.5)

representam a distribuição de probabilidade de encontrar o sistema canônico com energia E_M , usando médias no tempo e em ensembles, respectivamente.

5.3 Implementação do cálculo em Hamiltonianos nãolineares de primeiros vizinhos

Para ilustrar o cálculo proposto, vamos considerar a seguir duas classes especificas de Hamiltonianos com interações não-lineares de primeiros vizinhos que são analiticamente resolúveis,

$$H_N = K_N + V_N = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2} + V(q_{i+1} - q_i) \right],$$
(5.6)

com condições de contorno periódicas $(q_{N+1} \equiv q_1)$.

5.3.1 Modelo ferromagnético clássico de rotores XY

O primeiro caso que analisaremos é um conjunto de rotores clássicos em d = 1 onde $V(q_{i+1}-q_i) \equiv 1-\cos(q_{i+1}-q_i)$, de maneira que as coordenadas canônicas $q_i \in [0, 2\pi)$ e $p_i \in \mathbb{R}$ são a coordenada angular e o momento angular, respectivamente. Como antes, os rotores podem ser considerados com momento de inércia igual à unidade. Este Hamiltoniano é uma versão de primeiros vizinhos do HCM, idêntico ao Hamiltoniano que definimos para modelar o termômetro no capítulo anterior. É uma versão inercial do modelo ferromagnético clássico de rotores XY e constitui um protótipo de modelo dinâmico para sistemas de spins em mecânica estatística [128, 131].

O modelo é quase-integrável para baixas e altas energias. O regime de baixas energias é definido para T < 0.05 (energia específica e < 0.05) [128] e é chamado regime de acoplamento forte, para o qual os rotores se comportam como um conjunto de osciladores acoplados quase-linearmente. O regime de alta energia é definido aproximadamente para T > 10 (e > 6) [128], onde os rotores são quase livres (regime de acoplamento débil). Se sabe que o modelo apresenta desvios da estatística de BG tanto no regime de acoplamento forte quanto no caso onde o acoplamento é débil. Vamos nos concentrar no regime de energias intermediárias, e discutiremos a discrepância parcial que ocorre em altas energias.
5.3 Implementação do cálculo em Hamiltonianos não-lineares de primeiros vizinhos

A função de partição canônica

$$Z_{M} = \int \prod_{i=1}^{M} (dp_{i}dq_{i}) \exp\left[-\beta H_{M}(p_{i},q_{i})\right], \qquad (5.7)$$

conduz, neste modelo, a uma energia livre específica $f \equiv -\lim_{M\to\infty} [\ln Z_M/(M\beta)]$ (ver por exemplo, [128]):

$$f = -T \left[\frac{1}{2} \ln T + \ln I_0(\frac{1}{T}) + \ln 2\pi^{\frac{3}{2}} \right] + 1, \qquad (5.8)$$

onde $I_0(x)$ é a função de Bessel modificada do primeiro tipo de ordem zero. Invertendo esta relação $E(T) = F - T\partial F/\partial T$ obtém-se a curva calórica do equilíbrio de BG T(e), onde $e \equiv \lim_{M\to\infty} E_M/M$. Re-escalando o eixo e num fator M (e, como a temperatura é um parâmetro intensivo) obtemos $T(E_M)$.

Da integração da Eq. (5.4) se obtém $\omega(E_M)$ para qualquer valor grande e finito de M. Na Fig. 5.1(a) mostramos o logartimo de $\omega(E_M)$ para os rotores com interações de primeiros vizinhos com M = 100 e na Fig. 5.1(b) mostramos $p(E_M)$ no equilíbrio de BG para diversos valores da temperatura T e da energia especifica e. Note-se que, graças às propriedades elementares da função logarítmica, é possível implementar este cálculo para valores bastante grandes de M, já que se essencialmente trabalha com expoentes.

A conservação da energia total foi tipicamente de $\Delta E_N/E_N \simeq 10^{-3}$ (algumas realizações com 10^{-5} mostraram que 10^{-3} é suficiente para nossos objetivos). Em particular, checamos que as flutuações de energia do sistema completo (introduzidas pela precisão finita do algoritmo de integração) fossem ordens de magnitude menores que aquelas que haveriam na presença de um acoplamento térmico.

Um ponto importante para realizar um cálculo eficiente tem a ver com as condições iniciais, que devem ser próximas ao equilíbrio para evitar transientes longos. Desta maneira, focamos só nas propriedades de equilíbrio do modelo, descartando a possível presença de estados meta-estáveis ou quase-estacionários que pudessem aparecer com condições iniciais longe do equilíbrio. Como este sistema não observa transições de fases para T > 0, mas apresenta uma tendência ao agrupamento (*clustering*) à baixas temperaturas, temos usado distribuições Maxwellianas para os momentos ângulares utilizando a temperatura apropriada consistente com a energia do sistema. Para as condições iniciais dos ângulos usamos



Figura 5.1: Predição canônica analítica no equilíbrio de BG para o modelo inercial de rotores ferromagnéticos XY onde M = 100. (a) Logaritmo da densidade de estados $\omega_M(E_M)$. (b) $p(E_M) \equiv \omega_M(E_M) \exp(-E_M/T)/Z$, para diferentes temperaturas.

5.3 Implementação do cálculo em Hamiltonianos não-lineares de primeiros vizinhos

um conjunto de l distribuições Gaussianas. As distribuições têm a média $\langle \theta \rangle_i = \frac{2\pi}{i}$ onde $i = 1 \dots l$. Além disso, cada uma têm a mesma variância calculada apropriadamente para ser compatível com a energia total E_N . Esta configuração permite facilitar a relaxação ao equilibrio, em tempos computacionais acessíveis. Para nossos cálculos foi suficiente usar l = 6 para relaxações ao equilíbrio o bastante rápidas em todas nossas configurações microcanônicas. Temos checado também que esta eleição em particular não tem influência na forma funcional da FDP: é um procedimento numérico para poupar tempo computacional. Outras condições iniciais próximas ao equilíbrio eventualmente produzem os mesmos resultados. Para todos os nossos resultados temos esperado 10^3 passos de integração antes de começar nossas medições sobre o sistema canônico, composto por um subconjunto aleatório de M rotores adjacentes.

Na Fig. 5.2(a-c) apresentamos um notável acordo entre a predição analítica de BG para $p(E_M)$ (linha cheia) e as estimações dinãmicas de $p^{e}(E_M)$ (cruzes) para várias ordens de magnitude da energia específica e com uma configuração $(M, N) = (10^2, 10^3)$ e um número total de realizações $n = 5 \times 10^6$. Por outro lado, $p^{t}(E_M)$ (circulos), calculado com um número total de passo de integração $\tau = 5 \times 10^7$, mostra um bom acordo em relação à distribuição analítica de BG em energias intermediarias, mas exibe grandes discrepâncias no regime de acoplamento débil. Para quantificar estas diferenças, temos definido a *discrepância* $0 \le \epsilon \le 2$ entre duas distribuições de probabilidade como a integral do valor absoluto da diferença das distribuições. Para permitir uma comparação entre o máximo coeficiente de Lyapunov λ_{max} , na Fig. 5.2(d) apresentamos a quantidade

$$0 \le 1/\epsilon - 1/2 \le \infty \tag{5.9}$$

que é igual a zero para máxima discrepância e infinito para a sobreposição perfeita das distribuições. Enquanto para as médias de ensemble a quantidade $1/\epsilon - 1/2$ é grande e quase constante com a energia, no caso da média nos tempos esta quantidade apresenta uma diminuição importante para energias mais altas. Mais especificamente, temos verificado que o tempo necessário para ter uma flutuação típica de energia do subconjunto canônico $(\Delta E_M \sim E_M/\sqrt{M})$ cresce com a energia (ver círculos cheios na Fig. 5.2(d), onde repre-



Figura 5.2: (a-c) Comparação entre a predição de BG $p(E_M)$ (linha sólida), a média dinâmica de ensemble $p^{e}(E_M)$ (cruzes), e a média dinâmica no tempo $p^{t}(E_M)$ (círculos). A quantidade $k \equiv K_M/M$ é o valor da energia cinética média específica. (d) Análise da discrepância entre $p^{e}(E_M)$ e $p(E_M)$ (cruzes), e $p^{t}(E_M)$ e $p(E_M)$ (circulos vazios). Graficamos também o máximo coeficiente de Lyapunov λ_{max} (quadrados) e a inversa da escala de tempos de uma flutuação normal $1/t_{\Delta E_M}$ (círculos cheios). As linhas são para referência.

5.3 Implementação do cálculo em Hamiltonianos não-lineares de primeiros vizinhos

sentamos a inversa deste tempo) como conseqüência de que os rotores são cada vez mais livres (porque o potencial está limitado superiormente). Notamos que o máximo coeficiente de Lyapunov (quadrados na Fig. 5.2(d)) não mostra uma correlação significativa com o tempo que caracteriza a relaxação de $p^{t}(E_{M})$ (círculos na Fig. 5.2(a-c)) à distribuição de equilíbrio de BG $p(E_{M})$ (ver também [128] para uma discussão deste ponto). Isto significa que, neste sistema, o fato do valor do máximo coeficiente de Lyapunov ser positivo é uma medida de caos local e não implica a relaxação ao caos global.

Um resultado importante é a coincidência entre o valor da temperatura de Boltzmann Gibbs T_{BG} e o dobro da energia cinética específica $k \equiv K_M/M$ dentro da margem de erro de, como máximo, 2%. Notamos que as funções de densidade de probabilidade mostradas na Fig. 5.2 foram obtidas completamente por primeiros princípios e com completa independência da teoria de BG (a qual estamos checando). O acordo entre dinâmica e o fator de Boltzmann aparece ainda mais claramente na regressão linear da Fig. 5.3, onde representamos $\ln[p^{e}(E_M)/\omega(E_M)]$ para as médias de ensemble da Fig. 5.2(a-c).

Com outros valores de (M, N), em particular (50, 500) e $(10^3, 10^4)$, os resultados foram qualitativamente os mesmos.

5.3.2 Modelo β de Fermi-Pasta-Ulam

Também confirmamos nossos resultados implementando o mesmo procedimento de cálculo para o modelo β -FPU, definido pelo potencial $V(q_{i+1}-q_i) \equiv (q_{i+1}-q_i)^2/2+0.1(q_{i+1}-q_i)^4/4$ onde $q_i \in \mathbb{R}$. Considerando novamente condições iniciais próximas ao equilíbrio (ver, por exemplo, [128] para a solução canônica analítica e para uma discussão das condições iniciais). Embora é sabido que o modelo FPU apresenta, em comum com o modelo de rotores, comportamentos anômalos muito ricos a baixas energias [127, 128], para nossas condições iniciais e para as energias aqui testadas encontramos que $p^{t}(E_M)$ tem uma boa concordância com a predição de BG (Fig. 5.4).

Resumindo, usando o formalismo de BG e técnicas numéricas padrões, introdumos um novo cálculo que permite a comparação entre dinâmica Newtoniana não-linear e mecânica



Figura 5.3: Evidências dinâmicas do fator de Boltzmann. Mostramos $\ln[p^{e}(E_M)/\omega(E_M)]$ para as médias de ensemble da Fig. 5.2 (círculos). T é a quantidade recíproca à inclinação da regressão linear (linhas cheias) dos dados. As figuras inseridas (a) e (b) mostram uma ampliação dos resultados para e = 0.05 e e = 0.5, respectivamente.

5.3 Implementação do cálculo em Hamiltonianos não-lineares de primeiros vizinhos 101



Figura 5.4: Idem a Fig. 5.2(a-c) para o modelo β -FPU.

estatística canônica. Implementamos uma configuração padrão, e temos mostrado que a distribuição de energia de BG no espaço Γ concorda com a obtida dinamicamente (integrando as equações de Hamilton para condições iniciais próximas ao equilíbrio) para médias de ensemble. Verificamos esta conclusão para dois modelos paradigmáticos de Hamiltonianos não-lineares com interações de primeiros vizinhos.

Como um resultado secundário, este cálculo proporciona uma confirmação dinâmica da bem conhecida relação entre temperatura e energia cinética específica k = T/2 (para sistemas de uma dimensão).

Em relação às médias de tempos finitos, a energias moderadamente baixas, temos confirmado as predições de BG. No caso do modelo XY, a altas energias, se a escala de tempo não é muito longa, as médias de tempo finito coincidem com as médias de ensemble como conseqüência do aumento da escala de tempo de uma flutuação típica de energia. A dependência com a energia desta discrepância não mostra correlação com o máximo coeficiente de Lyapunov (ver também [128]).

Finalmente, remarcamos o fato que a estatística de equilíbrio provém da mecânica (de

precisão finita), ainda para um sistema em contato com um termostato (caso que normalmente é discutido através de técnicas de Monte Carlo ou Nosé-Hoover, para as quais não se deduzem as distribuições de equilíbrio, senão que se impõem [132]). De fato, essa é a importância das Figs. 5.2(a-c) e 5.4, onde círculos e cruzes tem sido obtidas da lei de Newton, enquanto que linhas cheias vêm do formalismo de BG. Equivalentemente, lembrando que a densidade de estados é um conceito puramente *mecânico*, a mesma conclusão pode se ver na Fig. 5.3.

Este procedimento de cálculo proporciona um maior entendimento na questão básica do fundamento dinâmico da mecânica estatística [124, 36, 128, 130, 131], e pode ser uma ferramenta útil na discussão de situações mais complexas (ver, por exemplo, [133]) onde discrepâncias dinâmicas em relação ao formalismo de BG, como os estado quase-estacionário que disutimos anteriormente, têm sido encontrados. A perspectiva da descrição de um sistema de longo alcance através deste cálculo e muito interessante, já que permitiria medir o fator estatístico diretamente no espaço Γ de Gibbs, com uma ferramenta integralmente de origem dinâmico. Porém, existem aspectos que ainda dificultam a implementação deste tipo de cálculo. Por exemplo, deve se definir a natureza do ensemble microcanônico, ou seja, se seus elementos também devem ter interações de longo alcance ou se pelo contrario, ele deve ser de curto alcance. Uma dificultade adicional é na definição do acoplamento entre o sistema canônico e o microcanônico. Finalmente, note-se que ainda implementando o cálculo a través das energias e não dos microestados, tem-se o problema da alta dimensionalidade do espaço Γ . Este trabalho está atualmente em andamento [70].

Capítulo 6

Aspectos da mecânica estatística não-extensiva em sistemas financeiros

Os mercados financeiros podem ser caracterizados por diferentes variáveis que dependem do tempo. Estas variáveis freqüentemente ficam registradas dando lugar às típicas séries temporais financeiras. Um exemplo disto é a evolução do preço das ações de uma dada companhia na bolsa de valores. Estas séries temporais características dependem da interação dinâmica de vários sistemas interagentes. É, portanto, mais um exemplo de sistema complexo.

Nas últimas duas ou três décadas tem-se melhorado significativamente a possibilidade de acessar e processar facilmente enormes quantidades de dados financeiros de alta freqüência, em escalas que vão desde minutos até a ordem de anos [137]. Isto tem estimulado a atenção de muitos autores de disciplinas diferentes pela possibilidade de descrever a dinâmica de mercados financeiros, e mais concretamente, a possibilidade de predizer sua evolução.

Em particular, a física estatística tem sido uma das áreas mais envolvidas. A possibilidade de aplicar métodos e ferramentas que já tiveram sucesso em outros sistemas complexos abre novas perspectivas na análise destes sistemas. De fato, o estudo das propriedades estatísticas de observáveis financeiros têm permitido a elaboração de novos modelos que conseguem descrever corretamente propriedades importantes [145]. Neste capítulo apresentamos certa classe de modelos aplicados a séries temporais financeiras e discutimos sua relação com a mecânica estatística não-extensiva.

O resto do capítulo se organiza da seguinte maneira: na próxima seção introduziremos alguns conceitos específicos e a terminologia de sistemas financeiros assim como uma breve resenha do recente formalismo superestatístico, cujos conceitos são muito próximos à mecânica estatística não-extensiva. Na seção 6.2 apresentamos modelos estocásticos microscópicos para o comportamento dinâmico de certo tipo de variáveis financeiras [64]. Na seção 6.3 discutiremos algumas propriedades multifractais destas séries temporais e, em particular, sua relação com o q-tripleto introduzido em capítulos anteriores [63]. Finalmente, na seção 6.4 estudamos o grau de dependência usando uma generalização nãoextensiva da medida de informação de Kullback-Leibler [62].

6.1 Introdução

Um investimento é um certo capital que é aplicado em alguma atividade econômica com objetivo de lucro. No mundo financeiro, os investimentos podem ser com ou sem risco. O risco é a variável que quantifica a probabilidade de perda ou ganho do investimento, ou simplesmente o seu grau de incerteza. É por isso que a lei empírica diz: quanto maior o risco, maior o potencial de lucro do investimento.

Um exemplo de investimento sem risco é uma conta de poupança em um banco, onde existe uma taxa fixa que assegura o lucro. Por outro lado, um exemplo de investimento com risco é a compra de uma ação pertencente a uma dada companhia. Uma ação é um valor variável que é representativo da menor parcela em que se divide o capital da companhia. Então, a ação representa de alguma maneira a "propriedade" de uma (pequena) parte da companhia.

A compra e venda de ações é normalmente feita em instituições organizadas chamadas bolsas de valores, como a Bovespa (*Bolsa de Valores de São Paulo*), a NASDAQ (*National Association of Securities Dealers Automated Quotations*, a bolsa de valores eletrônica americana) ou a NYSE (*New York Stock Exchange*). A maior parte das bolsas de valores

6.1 Introdução

trabalham com *índices*, que representam a variação estatística do valor (apropriadamente calculado, por exemplo através de médias pesadas) de um conjunto de bens ou de um mercado em particular, em relação a um período tomado como referência. Um exemplo é o Ibovespa, o índice que acompanha a evolução média das cotações da maior parte das ações negociadas na Bovespa. Outro exemplo é o *Dow Jones Industrial Average* (DJIA), que é – sem dúvida – o índice de ações mais conhecido, e o mais antigo em operação. O DJIA corresponde à média (pesada conforme o preço de cada ação componente) das 30 companhias mais influentes no mundo (28 companhias industriais pertencentes que cotam na NYSE e duas companhias que cotam na NASDAQ (Microsoft e IBM)) e é aproximadamente uma medida da evolução da parte do mercado associada ao índice. Neste capítulo apresentamos resultados baseados precisamente na análise das séries temporais pertencentes às companhias constituintes do DJIA, entre os dias 1 de Julho de 2004 e 31 de Dezembro de 2004. Vamos nos referir a este conjunto de 30 séries temporais como DJ30, para diferenciá-lo do DJIA (que é o índice que representa as 30 companhias).

Como uma ação representa o valor de uma parte da companhia, o preço da ação reflete de alguma maneira o valor líquido dessa companhia. Contudo, o valor da firma no presente não depende só do estado atual dela, mas também de seu futuro desempenho. Portanto, na análise de dados financeiros, o problema de fundo consiste em predizer o comportamento futuro baseado na informação atual. Qualquer nova informação que possa de alguma maneira ou de outra afetar esta futura *perfomance*, terá como conseqüência a mudança no preço da ação. Assim, o preço futuro de uma ação está sempre associado a uma incerteza, que faz com que a descrição natural da sua evolução seja em termos de probabilidades. É por isto que a comunidade estatística tem um forte interesse em sistemas financeiros.

6.1.1 Equações diferenciais estocásticas

Uma poderosa ferramenta da física para modelar este tipo de sistemas são as equações diferenciais estocásticas. A seguir, introduzimos (muito brevemente) alguns conceitos sobre equações diferenciais estocásticas usados em parte deste capítulo. As equações diferenciais estocásticas são uma maneira de generalizar as equações diferenciais ordinárias acrescentando o fator estocástico que modela efeitos aleatórios no sistema. Uma forma geral para uma equação diferencial estocástica em uma dimensão é

$$\frac{dx(t)}{dt} = b(x(t))) + B(x(t))\eta(t) \qquad (t > 0), \tag{6.1}$$

onde $x(0) = x_0$ é a condição inicial e $\eta(t)$ é o termo estocástico ou ruído. Freqüentemente se usa o chamado ruído branco, que tem as seguintes propriedades: $\langle \eta(t) \rangle = 0$ e $\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = \delta(t-t')$.

No caso em que b = 0, B = 1 e $x_0 = 0$ temos que

$$\frac{dx(t)}{dt} = \eta(t). \tag{6.2}$$

Porém, esta equação é puramente formal já que se sabe que pela natureza aleatória de $\eta(t), x(t)$ não é diferenciável para nenhum tempo t > 0.

Este problema foi resolvido, através de argumentos dinâmicos, por L. Bachelier no seu trabalho de 1900 sobre mudanças de preços no bolsa de valores de Paris [174] e também por A. Einstein no seu artigo de 1905 sobre movimento Browniano [175]. Uma descrição matemática rigorosa foi construída por Wiener [178, 150] em 1923 pelo qual a quantidade x(t) em 6.2 passou a se chamar processo de Wiener W(t). As propriedades do processo de Wiener $\{W(t), t \ge 0\}$ são: i W(0) = 0, ii os incrementos W(t) - W(s) são estacionários e independentes, iii para t > s, W(t) - W(s) têm uma distribuição normal $\mathcal{N}(0, \sqrt{t-s})$ e iv as trajetórias são contínuas.

Com efeito, no caso geral e usando $\eta(t) = \frac{dW(t)}{dt}$ temos que

$$\frac{dx(t)}{dt} = b(x(t)) + B(x(t))\frac{dW(t)}{dt} \qquad (t > 0),$$
(6.3)

e finalmente, multiplicando por dt obtemos,

$$dx(t) = b(x(t))dt + B(x(t))dW(t) \qquad (t > 0),$$
(6.4)

onde $x(0) = x_0$. Esta equação, apropriadamente interpretada, é uma equação diferencial estocástica. Se diz que x é solução da equação 6.4, se

$$x(t) = x_0 + \int_0^t b(x(s))ds + \int_0^t B(x(s))dW(s) \qquad (\forall t > 0),$$
(6.5)

A quantidade $\int_0^t B(x(s))dW(s)$ é uma integral estocástica, sendo o matemático japonês Kiyosi Itô quem definiu formalmente o formalismo de cálculo para este tipo de integrais [150]. A idéia detrás das integrais de Itô é subdividir o intervalo [0, t] em somas parciais

$$I_n = \sum_{i=1}^n g(t_{i-1}) \Delta W(t_i) \equiv \sum_{i=1}^n g(t_{i-1}) [W(t_i) - W(t_{i-1})]$$
(6.6)

onde a função g(t) tem de satisfazer, entre outras propriedades, o fato de ser *não* antecipativa. Isto significa, em particular, que o valor de $g(t_{i-1})$ não depende do seguinte incremento ΔW_i . Desta maneira, na definição de integral de Itô, a idéia crucial é que a variável g(t) é calculada no inicio do intervalo $\Delta t = t_i - t_{i-1}$. É interessante notar que existe outra possibilidade que é calcular g(t) em um ponto médio $t^* = (t_{i-1} - t_i)/2$. Isto dá lugar às integrais de Stratonovich [165]. Neste trabalho só usaremos integrais de Itô.

O cálculo de Itô não tem as mesmas regras do cálculo usual. Uma maneira de entender isto é que, como mencionamos anteriormente, $W_t - W_s$ tem uma distribuição normal com $E[W_t - W_s] = 0$ e $E[(W_t - W_s)^2] = t - s$. Destas propriedades (ver [31] para uma discussão matematicamente formal) pode se ver intuitivamente que

$$dW \approx \sqrt{dt}.\tag{6.7}$$

Esta relação implica uma modificação na regra de diferenciação usual, sendo substituída pela chamada *fórmula de Itô*. Dada uma equação estocástica

$$dx = Fdt + GdW \tag{6.8}$$

com F, G apropriadamente definidos, e seja U uma função contínua com derivadas $\partial U/\partial t, \partial U/\partial x$ e $\partial^2 U/\partial x^2$ contínuas. Seja

$$Y = U(x(t), t) \tag{6.9}$$

então Y corresponde a uma equação diferencial

$$dY = \left(\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial U}{\partial x}F + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}G^2\right)dt + \frac{\partial U}{\partial x}G\,dW.$$
(6.10)

A formula de Itô permite passar de uma equação estocástica dx = Fdt + GdW para outra dY = F' dt + G' dW função do mesmo processo W. É de se destacar que a parte flutuante do processo primário x(t) contribui ao *drift* do processo derivado Y(t) através do termo $\frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} G^2$.

Finalmente, da equação 6.4, se as funções b(x(t)) e B(x(t)) são suficientemente bem comportadas podemos derivar a equação de Itô-Fokker-Planck (progressiva) associada [155]

$$\frac{\partial}{\partial t}p(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x}b(x(t))p(x,t) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}B(x(t))^2)p(x,t).$$
(6.11)

que define a evolução da probabilidade p(x,t) em função das funções do modelo microscópico b(x(t)) e B(x(t)).

6.1.2 Superestatística

Recentemente Beck e Cohen [151, 7, 9] propuseram uma interessante abordagem alternativa para chegar à distribuição

$$p_i = \frac{\left[1 - (1 - q)\beta'_q E_i\right]^{\frac{1}{1 - q}}}{Z'_q} = \frac{e_q^{-\beta'_q E_i}}{Z'_q},\tag{6.12}$$

que surge do formalismo canônico da mecânica estatística não-extensiva, com a diferença que chegaram neste resultado baseados somente na mecânica estatística de BG. Esta proposta é chamada superestatística, e consiste na superposição de duas estatísticas. Aqui analisamos brevemente as idéias básicas. Consideramos um sistema fora do equilíbrio sujeito a flutuações espaço-temporais de um parâmetro intensivo, como por exemplo a inversa da temperatura β . Localmente, ou seja em regiões espaciais caracterizadas por células (no espaço físico) onde β é aproximadamente constante, o sistema é descrito pela mecânica estatística ordinária, ou seja pelo fator de Boltzmann $e^{-\beta E}$, onde E é uma energia efetiva de cada célula. A longo prazo o sistema é descrito por uma média espaço-temporal sobre as flutuações de β . Desta forma se obtém a superposição da estatística $e^{-\beta E}$ com aquela do próprio β . Em relação a β , se pode definir um fator de Boltzmann médio,

$$B(E) \equiv \int_0^\infty d\beta f(\beta) e^{-\beta E},$$
(6.13)

onde $f(\beta)$ é a distribuição de probabilidade de β . Pela assim chamada superestatística de tipo A, se normaliza este fator de Boltzmann efetivo obtendo a distribuição de probabilidade estacionária a longo prazo

$$p(E) = \frac{B(E)}{Z},\tag{6.14}$$

onde

$$Z \equiv \int_0^\infty dEB(E). \tag{6.15}$$

Na superestatística de tipo B se inclui a normalização (dependente de β) no processo de média. Neste caso

$$p(E) \equiv \int_0^\infty d\beta f(\beta) \frac{e^{-\beta E}}{Z(\beta)},\tag{6.16}$$

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

$$\tilde{f}(\beta) \equiv c \frac{f(\beta)}{Z(\beta)},$$
(6.17)

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

O aspecto interessante da superestatística é que ela é baseada na mecânica estatística usual (no fator de Boltzmann $e^{-\beta E}$ obtido maximizando localmente a entropia de BG), mais as flutuações em β . É também possível introduzir formas entrópicas generalizadas que são máximas para estes p(E) [32] e que são associados a uma descrição termodinâmica efetiva de um sistema fora do equilíbrio onde se faz a média sobre as flutuações. Além disto, a abordagem superestatística permite derivar formulas explícitas que associam o parâmetro q à variância relativa das flutuações de β .

Uma realização dinâmica simples da superestatística pode ser construída considerando equações diferenciais estocásticas com parâmetros espaço-temporais flutuantes [8]. Para tal se considera uma equação de Langevin para uma variável u,

$$\dot{u} = \gamma F(u) + \sigma L(t), \tag{6.18}$$

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

$$\beta \equiv \frac{\gamma}{\sigma^2} \tag{6.19}$$

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

$$p(u|\beta) = \frac{e^{-\beta V(u)}}{Z(\beta)}; \tag{6.20}$$

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

$$p(u,\beta) = p(u|\beta)f(\beta); \qquad (6.21)$$

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

$$p(u) = \int_0^\infty d\beta p(u|\beta) f(\beta).$$
(6.22)

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

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

$$f(\beta) = \frac{1}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \left(\frac{n}{2\beta_0}\right)^{\frac{n}{2}} \beta^{\frac{n}{2}-1} e^{-\frac{n\beta}{2\beta_0}}.$$
(6.23)

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

$$\beta \equiv \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \tag{6.24}$$

é dada pela Eq. (6.23). A média do parâmetro flutuante β é dada por

$$\langle \beta \rangle = n \langle x^2 \rangle = \int_0^\infty d\beta f(\beta) \beta = \beta_0,$$
 (6.25)

e a variância por

$$\langle \beta^2 \rangle - \beta_0 = \frac{2}{n} \beta_0^2. \tag{6.26}$$

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

$$p(u|\beta) = \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} e^{-\frac{\beta u^2}{2}},\tag{6.27}$$

e pela probabilidade marginal

$$p(u) = \frac{\Gamma\left(\frac{n}{2} + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \left(\frac{\beta_0}{\pi n}\right)^{\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{\beta_0}{n}u^2\right)^{-\frac{n}{2} - \frac{1}{2}}.$$
(6.28)

A equação diferencial estocástica (6.18), com um $\beta = \gamma/\sigma^2$ distribuído com uma distribuição χ^2 , produz então a distribuição canônica generalizada da mecânica estatística não-extensiva

$$p(u) \propto \left[1 - (1-q)\frac{\tilde{\beta}}{2}u^2\right]^{\frac{1}{1-q}},$$
 (6.29)

se fizermos as seguintes identificações:

$$q \equiv 1 + \frac{2}{n+1},$$
 (6.30)

$$\tilde{\beta} \equiv \frac{2}{3-q}\beta_0. \tag{6.31}$$

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

112 Aspectos da mecânica estatística não-extensiva em sistemas financeiros

Existem várias outras superestatísticas, definidas pela escolha da distribuição $f(\beta)$. Notavelmente, todas elas têm a mesma correção da primeira ordem do fator de Boltzmann para E pequeno, que coincide com a estatística não-extensiva [151]. Para qualquer destas superestatísticas se pode em geral definir um parâmetro q através da relação (veja também [29])

$$q = \frac{\langle \beta^2 \rangle}{\langle \beta \rangle^2},\tag{6.32}$$

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

Na seguinte seção, apresentamos modelos estocásticos no contexto de mercados financeiros, onde usamos a metodologia da superestatística para descrever séries temporais financeiras reais.

6.2 Modelos estocásticos de observáveis financeiros

Como se sabe, distribuição Gaussiana, que é recuperada no limite $q \rightarrow 1$ da função q-Gaussiana (Eq. 1.18), pode ser derivada de um sem número de maneiras diferentes. Em particular, começando pela dinâmica de Langevin que descreve o movimento Browniano usual, podemos escrever a equação de Fokker-Planck associada, e dela, obter como solução a distribuição Gaussiana. Analogamente, é possível também obter a distribuição q-Gaussiana seguindo o mesmo procedimento, ou seja, partindo de certas classes de equações diferenciais estocásticas e de suas equações de Fokker-Planck associadas.

Nesta seção apresentamos resultados neste sentido de dois tipos de variáveis financeiras definidas em intervalos de tempos fixos, o *lucro de 1 minuto* e o *volume negociado, v.* A análise empírica destas duas variáveis indica que suas funções de densidade de probabilidade são bem caracterizadas por q-Gaussianas, no caso do lucro, e por distribuições q-Gamma, no caso do volume. Nesta seção, aplicamos modelos estocásticos às séries temporais das companhias que formam o índice DJIA. Nossos modelos reproduzem estas distribuições de maneira muito satisfatória.

6.2.1 Modelo microscópico para o volume negociado

O volume negociado v é simplesmente o número de transações de uma ação em um dado intervalo de tempo.

É conhecido o fato que existem padrões dentro dos dias na atividade financeira. Com efeito, embora não se saiba completamente como este efeito é gerado, uma explicação possível é a informação que se acumula sobre o fechamento da bolsa e portanto alguns agentes são muito ativos nas primeiras horas, e outros nas últimas [169]. É preciso evitar correlações que tenham a ver com estes padrões artificiais, para poder quantificar corretamente as propriedades intrínsecas do mercado.

Para evitar estes fatores espúrios, extraímos os padrões de dentro de cada dia da série temporal original e normalizamos cada elemento da série pelo valor médio. Desta maneira, definimos o volume negociado médio v(t) como

$$v(t) = \frac{V'(t)}{\langle V'(t) \rangle}, \tag{6.33}$$

sendo

$$V'(t) = \frac{V(t)}{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} V(t'_i)},$$
(6.34)

onde $\langle ... \rangle$ significa média no tempo, v > 0, t' representa o tempo dentro do dia, i representa o dia, e N é o número total de dias, sendo nosso caso da ordem de $N \sim 5 \times 10$ 4..

O caráter não-linear desta variável manifesta-se na exibição de *caudas* assintoticamente tipo lei de potência na correspondente função de densidade de probabilidade [185, 141]. Com efeito, em [141] afirma-se empiricamente que a função de densidade de probabilidade do volume negociado é descrita corretamente pelo seguinte *ansatz*:

$$P(v) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \left(\frac{v}{\varphi}\right)^{\rho} e_q^{-\frac{v}{\varphi}},\tag{6.35}$$

onde v representa o volume negociado normalizado, $\rho \in \varphi$ são os parâmetros da distribuição, e $\mathcal{Z} = \int_0^\infty \left(\frac{v}{\varphi}\right)^\rho e_q^{-\frac{v}{\varphi}} dv.$

114 Aspectos da mecânica estatística não-extensiva em sistemas financeiros

A distribuição (6.35) pode ser considerada uma generalização da distribuição Gamma $p(v) \sim (\frac{v}{\theta})^{\alpha} e^{-\frac{v}{\theta}}$, já que esta é recuperada no limite $q \to 1^1$.

Como se sabe, um possível mecanismo dinâmico para este observável é dado pela equação estocástica [141, 186],

$$dv = -\gamma \left(v - \frac{\omega}{\alpha}\right) dt + \sqrt{2\frac{\gamma}{\alpha}} v \, dW_t, \tag{6.36}$$

onde W_t é um processo de Wiener regular e portanto tem uma distribuição normal e $v \ge 0$. O lado direito da Eq. (6.36) contém dois termos. O termo determinístico representa o mecanismo natural do sistema que tende a manter o volume negociado em um valor médio, ω/α , com um tempo de relaxação cuja escala é de ordem γ^{-1} . O termo estocástico representa os efeitos microscópicos aleatorios na evolução de v como um processo de ruído multiplicativo (este tipo de modelo se usa em diversos sistemas dinâmicos, como sistemas com resonancia estocástica [180], transições de fase induzidas por ruído [181], sistemas granulares [182] entre outros, e se sabe que, para certos casos [183], está associado a soluções q-Gaussianas). Esta dinâmica, junto com a equação de Fokker-Planck correspondente [150] têm como solução uma distribuição estacionária tipo Gamma invertida,

$$f(v) = \frac{1}{\omega \Gamma[\alpha+1]} \left(\frac{v}{\omega}\right)^{-\alpha-2} e^{-\frac{\omega}{v}}.$$
(6.37)

Consideramos agora, na mesma linha que a superestatística de Beck e Cohen introduzida na seção anterior, que ω (que se considerava constante) agor depende do tempo. Além disso, assumimos que ω muda numa escala T muito maior que γ^{-1} que determina a escala de tempo da relaxação ao estado estacionário na Eq.(6.36). Esta dependência no tempo de ω , pode ser associada a mudanças no volume de atividade (número de agentes que realizam transações), a eventos inesperados ou mesmo à retroalimentação do mercado à própria mudança de preços [142].

Com efeito, temos verificado que existe um rápido decrescimento da função de correlação (em relação ao equilíbrio local) e posteriormente um decaimento mais lento para tempos

¹Esta distribuição é conhecida na estatística como distribuição F. Para valores pequenos de v tende a zero como uma lei de potência, $p(v) \sim v^{\alpha}$, e para valores grandes de v também se comporta assintoticamente como lei de potência, $p(v) \sim v^{\alpha/(1-q)}$



Figura 6.1: Função de correlação para as 30 séries temporais analisadas (símbolos) e ajuste com uma exponencial dupla com tempos característicos $\gamma^{-1} = 27$ e T = 844. As duas escalas de tempo na Eq.(6.38) têm uma razão de aproximadamente 32 ($R^2 = 0.981$ e $\chi^2 = 2 \times 10^{-2}$ com unidades de tempo em minutos).

mais longos, como se pode ver na Fig. 6.1. Estes decrescimentos são produto de um decaimento lento nas correlações de ω , mais especificamente,

$$C[v(t), v(t+\tau)] = C_1 e^{-\gamma \tau} + C_2 e^{-\tau/T}.$$
(6.38)

O decrescimento lento é consistente com a dinâmica lenta que propomos para ω , que por outro lado é condição necessária na aplicação de um modelo superestatístico. Em nossas simulações numéricas temos definido o tempo em unidades de γ^{-1} (em conseqüência $\gamma^{-1} = 1$).

Aqui assumimos que ω tem como função de densidade de probabilidade a uma função Gamma (como o exemplo que exibimos para β na seção anterior),

$$P(\omega) = \frac{1}{\lambda \Gamma[\delta]} \left(\frac{\omega}{\lambda}\right)^{\delta-1} e^{-\frac{\omega}{\lambda}},\tag{6.39}$$

neste caso a equação (6.37) não representa a probabilidade de v mas a probabilidade condicional de v dado certo valor de ω , p(v|w). Portanto usando a relação $p(v) = \int_0^\infty p(v|w) P(\omega) d\omega$, obtemos que

$$p(v) = \frac{1}{Z} \left(\frac{v}{\theta}\right)^{-\alpha-2} e_q^{-\frac{\theta}{v}}$$
(6.40)

onde Z é a constante de normalização e a relação entre os parâmetros do modelo e a solução estacionaria é

$$\lambda = \theta (q-1), \qquad (6.41)$$

$$\delta = \frac{1}{q-1} - \alpha - 1. \tag{6.42}$$

Para estabelecer a relação entre a equação (6.40) e o ansatz (6.35), podemos usar a identidade [2] (válida para q > 1),

$$x^{a}e_{q}^{-\frac{x}{b}} = \left[\frac{b}{q-1}\right]^{\frac{1}{q-1}} x^{a-\frac{1}{q-1}} e_{q}^{-\frac{b/(q-1)^{2}}{x}}.$$
(6.43)

Com efeito, fazendo a identificação $\theta = \frac{\varphi}{(q-1)^2}$, e $-\alpha - 2 = \rho - \frac{1}{q-1}$, e usando na identidade (6.43) $a = \varphi$ e $b = \rho$, pode se ver que (6.40) e (6.35) coincidem, com $Z = (q-1)^{2\rho + \frac{1}{1-q}} Z$. Isto permite estabelecer a relação entre os parâmetros observados (que correspondem a (6.35)) e os parâmetros do modelo, em particular, o índice q. Utilizando (6.41) e (6.42) podemos ver que

$$q = 1 + \frac{\varphi}{\lambda}, \tag{6.44}$$

$$\rho = \delta + 1. \tag{6.45}$$

Portanto, o índice não-extensivo q se afasta do comportamento exponencial de (6.40)) através dos parâmetros de escala $\varphi \in \lambda$ das distribuições (6.35) e (6.39), respectivamente.

Construímos com as séries temporais as funções de densidade de probabilidade correspondentes. Usamos os valores dos ajustes de α , $\theta \in q$ da Tabela I para gerar um conjunto de



Figura 6.2: Extrato da série temporal real de Pfizer (figura superior) e a série temporal gerada correspondente a mesma companhia, usando os valores apresentados na Tabela I (t em minutos).

séries temporais com o objetivo de estabelecer a validade do nosso modelo. Para o cálculo das escalas temporais γ^{-1} e T, temos considerado a abordagem mais simples: a razão entre as duas escalas de tempo que descrevem a função de correlação do volume negociado. Os valores de ω usados para imitar a série temporal foram obtidos de processos estacionários de Feller [179] com uma relaxação T_i onde *i* representa uma das 30 companhias.

Este enfoque é probabilisticamente equivalente ao exibido em [141, 142], mas é mais realista em relação à dependência de v com os momentos de Kramers-Moyal. Em outras palavras, este modelo tem, em princípio, uma melhor abordagem dinâmica [152].

Em relação aos valores obtidos através dos ajustes de q, θ , e α , verificamos que no caso de q os valores se restringem a um intervalo pequeno, 1.19 ± 0.02 (próximo a $\frac{6}{5}$) e apresentam uma maior variabilidade nos outros parâmetros, $\alpha = 2.63 \pm 0.48$ e $\theta = 8.31 \pm 1.86$.

Nas Figuras 6.2 e 6.4 apresentamos a comparação do volume negociado das ações de Pfizer e de Citigroup, assim como as réplicas das séries temporais obtidas usando o mo-

Tabela 6.1: Valores do ajuste à função de densidade de probabilidade $(q, \theta \in \alpha)$. e da análise da correlação (γT) .

	q	θ	α	$T\gamma$
AA	1.19	8.81	2.67	29
AIG	1.22	4.32	1.84	34
AXP	1.21	6.51	2.06	26
ВА	1.18	10.67	2.95	24
С	1.15	9.20	3.18	25
CAT	1.20	7.49	2.32	13
DD	1.20	7.33	2.26	53
DIS	1.21	7.29	2.19	20
GE	1.17	8.31	2.75	33
GM	1.21	8.14	2.46	29
HD	1.17	8.76	2.84	27
HON	1.19	9.06	2.67	70
HPQ	1.19	8.55	2.64	28
IBM	1.14	12.36	3.70	41
INTC	1.20	4.22	1.70	25
JNJ	1.17	8.55	2.91	11
JPM	1.17	9.14	2.92	22
KO	1.19	7.88	2.61	26
MCD	1.21	7.48	2.30	30
MMM	1.19	7.14	2.33	23
MO	1.18	7.73	2.66	12
MRK	1.25	1.24	0.61	21
MSFT	1.22	4.57	1.62	23
PFE	1.18	6.31	2.44	33
\mathbf{PG}	1.16	8.94	2.99	23
SBC	1.19	8.62	2.57	25
UTX	1.14	18.47	4.71	32
VZ	1.17	8.83	2.84	34
WMT	1.16	10.24	3.23	30
XOM	1.15	11.45	3.50	31



Figura 6.3: O símbolos representam a função de densidade de probabilidade empírica das séries temporais dos volumes negociados para Pfizer (deslocada por um fator 10) e a Du Pont, que correspondem ao melhor ($R^2 = 0.9953$ e $\chi^2 = 0.0002$) e o pior ajuste ($R^2 = 0.9763$ e $\chi^2 = 0.001$), respectivamente. As linhas correspondem à simulação usando os valores apresentados na Tabela I.

delo 6.36. Na Fig. 6.3 mostramos nosso melhor e pior ajuste, Pfizer (PFE) e Du Pont (DD), respectivamente, enquanto que na Fig. 6.5 apresentamos a função de densidade de probabilidade correspondente a Citigroup. Em geral, pode-se ver que a concordância é notável.

6.2.2 Modelo estocástico para a dinâmica de lucro

Nesta seção, apresentamos um modelo estocástico (similar ao exibido na seção anterior) para o lucro (return) r,

Definimos o lucro de um minuto, \tilde{r} como

$$\tilde{r}(t) = \log[S(t)] - \log[S(t-1)]$$
(6.46)



Figura 6.4: Um extrato da série temporal gerada por nosso mecanismo dinâmico (simulação) para reproduzir o volume negociado (1 minuto) das ações de Citigroup na bolsa de valores de New York (NYSE) (dados reais).

onde S(t) representa o valor de uma ação em particular. Por razões de simplicidade, utilizamos o lucro de 1 minuto normalizado r(t), que se obtém subtraindo a média e dividindo pelo desvio padrão,

$$r(t) = \frac{\tilde{r}(t) - \langle \tilde{r}(t) \rangle}{\sqrt{\langle (\tilde{r}(t) - \langle \tilde{r}(t) \rangle)^2 \rangle}},$$
(6.47)

Dada a seguinte equação tipo Langevin [176, 177]:

$$dr = -k r dt + \sqrt{\theta [p(r,t)]^{(1-q)}} dW_t \qquad (q \ge 1), \qquad (6.48)$$

(na convenção de Itô) onde W_t é um processo regular de Wiener e p(r, t) é a função de densidade de probabilidade instantânea dos retornos. O termo determinístico da Eq. (6.48) representa os mecanismos intrínsecos que tendem a manter o mercado em um retorno



Figura 6.5: Função de densidade de probabilidade do volume negociado (1 minuto) das ações de Citigroup. Os símbolos são para os dados e a linha sólida para a reprodução. Valores dos parâmetros: $\theta = 0.212 \pm 0.003$, $\rho = 1.35 \pm 0.02$, e $q = 1.15 \pm 0.02$ ($\chi^2 = 3.6 \times 10^{-4}$, $R^2 = 0.994$).

médio, ou em uma interpretação análoga, pode estar relacionado com a permanente competição entre preço especulativo e o valor real de uma companhia. Em nosso caso, usamos a abordagem mais simples e a escrevemos como uma força restauradora, com uma constante k, similar à força viscosa da equação de Langevin usual. O termo estocástico tem como objetivo reproduzir como o sistema responde microscopicamente aos retornos: θ é a constante de volatilidade (associada à variância de p(r,t)) e q, o índice não-extensivo, reflete a magnitude dessa resposta. Como as maiores instabilidades no mercado são introduzidas pelos valores de retorno menos esperados, é provável que o termo estocástico na Eq. (6.48) possa ter esta dependência com p(r, t).

Das equações 6.4 e 6.11 temos que a equação de Itô-Fokker-Planck associada à Eq. (6.48) é dada por,

$$\frac{\partial p(r,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r} \left[k r p(r,t) \right] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \left\{ \theta \left[p \left(r,t \right) \right]^{(2-q)} \right\}, \tag{6.49}$$

e a função de densidade de probabilidade estacionaria é [176, 150, 123],

$$p(r) = \frac{1}{Z} \left[1 - (1-q) \frac{k r^2}{(2-q) Z^{q-1} \theta} \right]^{\frac{1}{1-q}}.$$
 (6.50)

Uma das características mais interessantes da Eq. (6.48) é sua capacidade para reproduzir a conhecida forma de U do 2^{do} momento de Kramers-Moyal (n = 2).

$$M_n(r,t,\tau) = \int (r'-r)^n P(r',t+\tau|r,t) dr' \approx \tau \theta [p(r,t)]^{(1-q)} .$$
 (6.51)

Na Fig. (6.6) apresentamos uma função de densidade de probabilidade típica para os retornos medidos cada 1 minuto de uma das companhias constituintes do DJIA e o ajuste $q = 1.31 \pm 0.02$. Na Fig. 6.7 mostramos uma série temporal gerada pela Eq. (6.48), e finalmente o segundo momento de Kramers-Moyal (com forma de U) para os nossos dados. Nossos resultados apresentam uma boa concordância com os dados.

Podem se fazer várias melhoras neste modelo, por exemplo tomando em conta efeitos de aversão ao risco (*risk-aversion*), que introduzem assimetrias na função de densidade de probabilidade , ou acrescentando os efeitos das correlações na volatilidade. A formulação aqui apresentada tem também a vantagem de ser aplicável a sistemas que não estão no estado estacionário, já que as soluções dependentes do tempo da equação de Fokker-Planck são também do tipo q-Gaussianas [123].

6.3 Estrutura multifractal de variáveis financeiras e conexões com o q-tripleto

Uma característica comum nos sistemas complexos é a existência de comportamentos tipo lei de potência, que geralmente são uma amostra das invariâncias de escala típicas da complexidade. Esta invariância de escala (auto-afinidade, para séries temporais) podem ser associadas, no caso de *monofractais*, a um único tipo de estrutura caracterizada por uma dimensão fractal H (o expoente de Hurst) [143]. Pode se dar o caso que se tenha uma composição de estruturas caracterizadas pelos expoentes locais ε , todas sustentadas



Figura 6.6: Função de densidade de probabilidade em função de r. Os símbolos correspondem à média das 30 companhias usadas para construir o DJ30. A linha representa a função de densidade de probabilidade obtida da série temporal gerada pela Eq. (6.49).



Figura 6.7: Série temporal gerada pela Eq. (6.36).



Figura 6.8: Segundo momento de Kramers-Moyal $M_2 \approx \tau \theta [p(r)]^{(1-q)} = \tau \frac{k}{2-q} [(5-3q)\sigma^2 + (q-1)r^2]$ do qual obtém-se o parâmetro k (se assume que $t_0 = -\infty \ll -k^{-1} \ll 0$. Os valores dos parâmetros são: $\tau = 1 \min, k = 2.40 \pm 0.04, \sigma = 0.930 \pm 0.08$ e $q = 1.31 \pm 0.02$.

em uma estrutura principal $f(\varepsilon)$, onde ε é o expoente de escala [143] responsável pela escala básica das propriedades do sistema estudado. Para calcular numericamente esta função temos aplicado o método MF-DFA [148]. Para este procedimento tem se provado que a função de flutuação de ordem q, $F_q(s)$, apresenta um comportamento de escala $F_q(s) \sim s^{h(q)}$. Esta correspondência entre o método MF-DFA e o formalismo multifractal padrão é obtida por

$$\tau(q) = q h(q) - 1,$$
 (6.52)

onde $\tau(q)$ é o expoente da função de partição generalizada. Da transformada de Legendre, $f(\alpha) = q \alpha - \tau(q)$, podemos relacionar $\tau(q)$ com o expoente de Hölder [159], α . Portanto, usando a equação prévia temos

$$\alpha = h\left(q\right) + q\frac{dh\left(q\right)}{dq}, \qquad f\left(\alpha\right) = q\left[\alpha - h\left(q\right)\right] + 1. \tag{6.53}$$

Na Fig. 6.9 (esquerda) mostra-se o espectro $f(\alpha)$ (linha sólida) obtida da média dos valores das 30 companhias para cada valor de q. Em nossa análise q vai desde -20 até 19.5.





Figura 6.9: Na figura esquerda mostra-se o espectro multifractal $f(\alpha)$ em função de α . Na figura direita os expoentes de escala $\tau(q)$ em função de q fazendo médias nas 30 companhias. A legenda na direita é válida também para a esquerda. A série temporal "original" e a misturada apresentam um caráter fortemente multifractal, enquanto que a série misturada com fases aleatórias apresentam uma largura estreita em α relacionada com a dependência quase-linear de $\tau_{fase-mist}(q)$ e também com a forte contribuição da função de densidade de probabilidade não-Gaussiana do volume negociado ao caráter multifractal.

Temos verificado que $f(\alpha)$ apresenta o amplo intervalo de expoentes desde $\alpha_{\min} = 0.32 \pm 0.04$ até $\alpha_{\max} = 1.09 \pm 0.04$, correspondentes a um comportamento fortemente multifractal. Para q = 2 se obteve $h(2) \equiv H = 0.71 \pm 0.03$ o qual concorda com a persistência observada previamente na análise do [158].

A partir de cada série temporal é possível definir outras séries relacionadas que podem nos ajudar a quantificar quais são os fatores que mais contribuem ao caráter multifractal do observável. Entre estes fatores temos as correlações lineares, as correlações não-lineares e as funções de densidade de probabilidade tipo lei de potência. Neste contexto, uma primeira série associada se obtém misturando os elementos (ou seja, em cada série se altera a ordem temporal dos valores) para tirar os efeitos de correlações. Com essa série misturada, se computa $h_{mist}(q)$. Partindo destas séries temporais descorrelacionadas construimos outro conjunto de séries associado, com o seguinte procedimento: aplicamos a transformada de Fourier a cada série temporal, mudamos a fase (no espaço de Fourier) aleatoriamente, e finalmente aplicamos a antitransformada de Fourier para voltar à variável tempo. Em conseqüência deste procedimento, estas novas séries têm distribuições estacionárias Gaussianas e expoente de escala $h_{fase-mist}(q)$.

Na Fig. 6.9(esquerda) mostramos que estas duas séries também apresentam um espectro multifractal, mas a série misturada tem um espectro mais largo que a série misturada com fases aleatórias. Em relação ao expoente de Hurst, h(2) = H, obtemos $H = 0.49 \pm 0.03$ para a série misturada e $H = 0.5 \pm 0.03$ para a série misturada com fases aleatórias. Considerando as margens de erro, estes valores são consistentes com H = 1/2 (movimento Browniano).

Além disso, temos construído, com o mesmo procedimento, uma série só com fases aleatórias para a qual se obtém $H = 0.7 \pm 0.03$. Do conjunto dos nossos resultados, concluímos que as correlações têm um papel chave no caráter persistente das séries temporais de volume negociado.

Usando a relação de escala $F_q(s)$ para estas três séries temporais [148] e assumindo que todos os fatores são independentes, podemos quantificar a influência das correlações da seguinte maneira,

$$h_{cor}(q) = h(q) - h_{mist}(q),$$
 (6.54)

a influência da função de densidade de probabilidade não-Gaussiana,

$$h_{PDF}(q) = h_{mist}(q) - h_{fase-mist}(q), \qquad (6.55)$$

e finalmente a influência do peso das não-linearidades,

$$h_{fase-mist}(q) \equiv h_{nlin}(q) = h(q) - h_{cor}(q) - h_{PDF}(q).$$
 (6.56)

O caráter multifractal das séries temporais pode ser analisado por meio das diferenças dos valores entre $h(q_{\text{max}}) \in h(q_{\text{min}})$, portanto, a quantidade

$$\Delta h = h\left(q_{\min}\right) - h\left(q_{\max}\right) \tag{6.57}$$

é uma maneira apropriada de caracterizar o caráter multifractal.

6.3 Estrutura multifractal de variáveis financeiras e conexões com o q-triple27

Para um mono-fractal temos que $\Delta h = 0$, ou seja, dependência linear de $\tau (q) \operatorname{com} q$. Na Fig. 6.9(direita) mostra-se $\tau (q)$ para diversas séries temporais das quais temos calculado os vários valores de Δh . Os resultados obtidos são os seguintes: $\Delta h = 0.675$, $\Delta h_{cor} = 0.027$, $\Delta h_{PDF} = 0.445$, e $\Delta h_{nlin} = 0.203$.

Então, podemos concluir que a influência das correlações lineares na natureza multifractal dos volumes negociados é mínima com Δh_{cor} correspondendo a 4% de Δh . Este valor é substancialmente menor que a influência de Δh_{nlin} que corresponde a 30% de Δh . Nossas comclusões concordam com resultados relativos à independência estatística (que serão apresentados na próxima seção) onde, usando uma medida de informação mútua generalizada [149], mostramos que as dependências não-lineares não são só mais fortes, mas também têm maior flexibilidade (no sentido de serem menos afetadas pelas modificações feitas às séries) do que as dependências lineares (correlações) nas séries temporais de volume negociado.

Finalmente, dos valores de Δh temos verificado que o fator principal para o caráter multifractal das séries é sua distribuição generalizada (não-Gaussiana) q-Gamma [158, 142, 62], com um peso de 66% em Δh .

O comportamento de $\tau(q)$ para q > 0 é bastante diferente que o de q < 0, o que também é visível na forte assimetria de $f(\alpha)$. Isto poderia indicar que flutuações grandes e pequenas aparecem devido a mecanismos dinâmicos diferentes. Este marco é consistente com a abordagem superestatística.

O q-tripleto em observáveis financeiros

Como vimos na seção 1.4, os sistemas termoestatísticos não-extensivos são bem descritos pelo q-tripleto (q_{est} , q_{sens} , q_{rel}), relacionados com a função densidade de probabilidade (associada a estacionaridade ou a meta-equilíbrio), a sensibilidade às condições iniciais, e a relaxação respectivamente. É claro que se o sistema não é um Hamiltoniano (como no caso do mercado financeiro), não se tem distribuição de energia e portanto q_{est} não pode ser definida da maneira usual. Podemos, no entanto, estimá-la através da q-Gaussiana do

estado estacionário (que generalizaria a distribiução Maxwelliana para as velocidades em um sistema BG no equilíbrio térmico). Por outro lado, os outros dois índices, q_{sens} e q_{rel} , são definidos da maneira usual.

Vamos nos concentrar então na estrutura multifractal das séries temporais dos *retornos*. Tem sido conjecturado, e depois provado para uma variedade de sistemas não-extensivos (dissipativos) de uma dimensão, a seguinte relação [191]:

$$\frac{1}{1 - q_{sens}} = \frac{1}{h_{\min}} - \frac{1}{h_{\max}}, \qquad (6.58)$$

onde h_{\min} e h_{\max} são os valores máximo e mínimo de h do espectro multifractal associado f(h). Assumindo a validade desta relação no nosso sistema não-linear e dissipativo, analisamos o espectro de nossas séries. Na Fig. 6.10 mostramos que o espectro multifractal dos retornos do DJ30, obtidos com a aplicação do método MF-DFA5 [148]; $h \in f(h)$ são calculados das médias dos dados reais das 30 companhias constitutivas. Através desta análise, determinamos que $h_{\min} = 0.28 \pm 0.04$ e $h_{\max} = 0.83 \pm 0.04$. Portanto, utilizando a Eq. (6.58) obtemos $q_{sens} = 0.58 \pm 0.10$. Considerando que o valor de q obtido para a função de densidade de probabilidade dos retornos era $q_{stat} = 1.31 \pm 0.02$, verifica-se (dentro da margem de erro) que a relação dual

$$q_{stat} + q_{sens} = 2 \tag{6.59}$$

é aproximadamente válida.

Levando-se em conta o bem conhecido decaimento rápido da auto-correlação dos retornos, vemos que as mudanças de preço para uma ação típica do DJ30 pode ser essencialmente descrita pelo q-tripleto $\{q_{sen}, q_{stat}, q_{rel}\} = \{0.58 \pm 0.10, 1.31 \pm 0.02, 1\}.$

Uma outra abordagem é analisar a *volatilidade*, que é definida como o valor absoluto dos retornos. Sabe-se que esta quantidade apresenta caudas, ou longo alcance, muito maior do que a relaxação rápida dos retornos. Se é esta a quantidade considerada como útil na descrição do sistema, então o valor do $q_{rel} = 6$. 6.4 Generalização da medida de informação mútua para a análise do grau de dependência 129



Figura 6.10: Espectro multifractal f(h) em função de h para os retornos (1 minuto) médios das 30 companhias onde $h_{\min} = 0.28 \pm 0.04$ e $h_{\max} = 0.83 \pm 0.04$.

6.4 Generalização da medida de informação mútua para a análise do grau de dependência

A função de correlação (6.38), matematicamente definida como,

$$C[v(t), v(t+\tau)] \equiv \frac{\langle v(t) v(t+\tau) \rangle - \langle v(t) \rangle^2}{\langle v(t)^2 \rangle - \langle v(t) \rangle^2}.$$

é uma das maneiras de quantificar o grau de dependência entre os elementos que compõem uma série temporal v(t). Como a função de correlação é basicamente a co-variância normalizada (ou o segundo cumulante normalizado do processo estocástico v(t)), só seria útil para descrever processos estocásticos que possuam correlações lineares. Em outras palavras, a função de correlação não é uma boa alternativa para determinar convenientemente as não-linearidades de um conjunto de dados.

Portanto, precisa-se duma quantidade mais conveniente para determinar esta dependência não-trivial em séries estocásticas, por exemplo, os retornos [177] ou processos GARCH [147] para os quais da função de correlação só se obtém valores nulos. Uma quantidade importante em teoria de informação e em teoria de probabilidades é o ganho de informação de Kullback-Leibler, que quantifica a variação média de informação de duas distribuições de probabilidade.

O ganho de informação de Kullback-Leibler pode se interpretar da seguinte maneira. Se consideramos uma variável aleatória X que toma valores x_1, \ldots, x_n com probabilidades $P = p_1, \ldots, p_n$. Interpretando a quantidade $\sigma_i = -\ln p_i$ como a informação contida no resultado *i*, a entropia usual de Shannon

$$S(p_1, \dots, p_n) = -\sum_{i=1}^n p_i \ln p_i$$
 (6.60)

pode ser interpretada como a média dos σ_i .

Se consideramos um primeiro conjunto de medições $P' = p'_1, \dots p'_n$ e um segundo conjunto de medições $P = p_1, \dots p_n$, então a variação de informação contida sobre o resultado $i \operatorname{será} \Delta \sigma_i = -\ln p'_i - (-\ln p_i)$. A variação de informação contida média se obtém fazendo médias em relação às novas medições definidas pelo conjunto dos p_i ,

$$K(p,p') \equiv \sum_{j} p_j \Delta \sigma_j = \sum_{j} p_j \ln \frac{p_j}{p'_j}$$
(6.61)

Este é o ganho de informação de Kullback-Leibler, também chamado entropia relativa, distância ou informação mútua de Kullback-Leibler. Esta quantidade funciona como uma distância estatística entre as duas distribuições de probabilidade, já que K(P, P') = 0quando P = P'. De fato, uma propriedade importante de K é que, em geral, $K(P, P') \ge 0$, sendo esta desigualdade a conhecida desigualdade de Gibbs. Além disso, é interessante destacar que K é uma função simétrica em relação à permutação de qualquer p_i ou p'_i mas não é simétrica no par P, P'. Este fato indica que K não pode ser considerada uma medida no sentido formal da teoria de medida.

Podemos generalizar o ganho de informação K utilizando o formalismo não-extensivo na sua definição. Para isto, usamos a q generalização da média (Eq. 1.10) e o q-logaritmo (Eq 1.23) (note-se que aqui o índice q não são os mesmos definidos nas seções anteriores). A diferença de informação contida será agora $\Delta \sigma_i^q = \left[\frac{1}{1-q}\right] \left(\left((1-p'_j)^{1-q}) - (1-p_j)^{1-q}\right)\right)$. Realizando a média generalizada obtemos
$$K_q(p,p') \equiv \sum_j \frac{p_j^q}{1-q} \left(p_j^{1-q} - p'^{1-q} \right), \qquad (6.62)$$

que é o ganho de informação de Kullback-Leibler generalizado. Fazendo uso explícito da Eq.(1.23), $K_q(p, p')$ pode ser escrito também como

$$K_q(p, p') = -\sum_j p_j \ln_q \frac{p'_j}{p_j},$$
(6.63)

Como sempre, se recupera a definição original (6.61) quando $q \rightarrow 1$.

A definição de ganho de informação pode ser estendida a variáveis contínuas da seguinte maneira

$$I(p, p') = -\int p(y) \ln \frac{p'(y)}{p(y)} \, dy.$$
(6.64)

Da mesma forma, a forma generalizada é

$$I_{q}(p,p') = -\int p(y) \ln_{q} \frac{p'(y)}{p(y)} dy$$
(6.65)

Esta quantidade foi introduzida em [149] dentro do contexto do formalismo não-extensivo para o estudo de dependências em variáveis financeiras. Neste capítulo usamos o ganho de informação generalizado para quantificar este grau de dependência do volume negociado v(t) estudado na seção 6.2.1.

Começamos construindo uma variável y aleatória bidimensional y = (x, z) onde $z = x + \tau \in \tau$ é o retardo ou "lag" entre as variáveis. Quantificamos o grau de dependência entre x e z calculando I_q para $p(x, z) \in p'(x, z) = p_1(x) p_2(z)$, onde p nesta última expressão representa a probabilidade marginal. Para este caso, sabe-se que I_q tem tanto um limite inferior quanto um limite superior. O limite inferior, $I_q^{MIN} = 0$, corresponde à independência total entre x e z, ou seja p(x, z) = p'(x, z). O limite superior, I_q^{MAX} , representa a situação em que as variáveis se correspondem completamente (p(x|z) = p(x))) e está dado por [149],

$$I_q^{MAX} = -\int \int p^q(x,z) \left[\ln_q p_1(x) + (1-q) \ln_q p_1(x) + \ln_q p_2(z) \right] dx dz.$$
(6.66)

A partir destes dois valores extremos, é possível normalizar 6.65

$$R_q = \frac{I_q}{I_q^{MAX}} \in [0, 1].$$
(6.67)

Esta quantidade tem um valor ótimo do índice q^{ot} no sentido que o gradiente de R_q é mais sensível e portanto é útil para detectar as variações na dependência entre as variáveis x e z. Analiticamente, está determinado pelo ponto de inflexão de R_q em função das curvas correspondentes a q ($\frac{dR_q}{dq}|_{q^{ot}} = 0$). Neste caso, $q^{ot} = 0$ representa uma dependência total (variáveis iguais) e $q^{ot} = \infty$ total independência (ver [149] para uma discussão mais detalhada).

Desta maneira, para avaliar o grau de dependência no volume negociado do DJ30, calculamos R_q em função de q para as 30 séries temporais usando x = v(t), $y = v(t + \tau)$, para vários valores do retardo τ . A seguir, calculamos o ponto de inflexão em cada perfil R, determinando $q^{ot}(\tau)$ para cada série (Fig. 6.4). Para cada τ fazemos a média entre as 30 séries do valor de q^{ot} . O resultado mostra-se na Fig. 6.12 como função de τ .

O comportamento de q^{ot} como função de τ , exibe um aumento lento de q^{ot} , ou seja, uma diminuição lenta do grau de dependência entre as variáveis. Este resultado sugere a existência de dependências presentes a longo prazo, que podem ser grandes contribuintes do comportamento multifractal do volume negociado.

Na Fig. 6.1 (na seção 6.2.1) mostramos a correlação entre $\tau = 1 \tau = 1000$ para permitir compará-la com nossos resultados. Pode se ver que a correlação diminui aproximadamente 80% enquanto que o valor de q^{ot} (Fig. 6.12) entre $\tau = 1024$ e $\tau = 1$ só se reduz em aproximadamente 20%, ou seja, uma diminuição no grau de dependência da mesma proporção.



Figura 6.11: Na figura esquerda, medida q-generalizada de Kullback-Leibler normalizada, R_q , em função do índice q, para International Business Machines (IBM). A figura inserida mostra, como ilustração, a derivada de R em relação a q para $\tau = 1$ minuto. O máximo corresponde a $q^{ot} = 1.58$.



Figura 6.12: Os símbolos representam o índice q^{ot} associado ao grau de dependência em função e τ . A variável τ está em unidades de minutos. Média das 30 séries temporais. A linha sólida representa o ajuste logarítmico $q^{ot} = 1.59 + 0.11 \log(\tau)$ (com índice de correlação $R^2 = 0.9944$), ilustrando o aumento lento de q^{ot} .

Capítulo 7

Conclusões

Neste capítulo apresentamos um breve resumo assim como as nossas considerações finais. O trabalho que aqui apresentamos estuda distintos tipos de sistemas complexos e sua relação com a mecânica estatística não-extensiva. Em geral, a estratégia usada para esta análise foi estudar a conexão entre as propriedades microscópicas (de origem dinâmica ou probabilística) e o comportamento macroscópico, tipicamente no limite termodinâmico, para entender que tipo de termoestatística emerge da dinâmica do sistema. Estudamos vários modelos diferentes, em contextos diferentes, mas todos eles têm aspectos em comum. Por um lado todos, de uma maneira ou outra, apresentam anomalias que indicam que não verificam os postulados do formalismo de BG. Por outro lado, todos eles podem ser considerados sistemas complexos. Com efeito, no capítulo 2 analisamos conjuntos de probabilidades globalmente correlacionadas com uma estrutura de tipo hierárquica. Posteriormente, nos capítulos 3 e 4 estudamos sistemas de muitos corpos com interações de longo alcance, discretos e contínuos respectivamente. Finalmente, aplicamos o formalismo da mecânica estatística não-extensiva a séries temporais reais e analisamos, entre outras coisas, suas propriedades multifractais.

Nossa conclusão geral é que o formalismo não-extensivo é um forte candidato a descrever corretamente certos sistemas complexos, onde há presença de interações de longo alcance espaciais ou temporais, ou estrutura multifractal do espaço de fases. Por outro lado, para certos casos, nossos resultados evidenciam uma origem dinâmica do índice q, como parece ser o consenso dentro do formalismo. Por último, apresentamos possíveis relações entre dualidades naturais da mecânica estatística não-extensiva e o q-tripleto.

A seguir, detalhamos nossas principais conclusões seguindo a organização usada ao longo do trabalho.

7.1 Sistemas de probabilidades com correlações globais hierárquicas

Analisamos um conjunto de probabilidades construídas de maneira que suas correlações sejam globais e que, ao mesmo tempo, tenham uma invariância de escala. Para isto, geramos o conjunto de probabilidades utilizando a regra de Leibniz, que nos assegura uma estrutura hierárquica em função do número de variáveis N. Por outro lado, usamos uma relação baseada no q-produto, uma generalização do produto dentro do formalismo da mecânica estatística não-extensiva. Nossa principal conclusão é que as distribuições emergentes para a média de N variáveis aleatórias (sendo $N \gg 1$) não são nem distribuições Gaussianas, nem distribuições de Lévy, mas um atrator diferente que, para p = 1/2, é uma q_e -Gaussiana (assimétrica). Verificamos numericamente a relação $q_e = 2 - \frac{1}{q}$, que relaciona o índice q_e da função de densidade de probabilidade emergente com o índice q do mecanismo que a gera. Se sugere a possibilidade de que esta relação esteja conformada pelas duas dualidades naturais $q \leftrightarrow \frac{1}{q} \in q \leftrightarrow 2 - q$, freqüentemente encontradas no formalismo não-extensivo (vide seção 1.3.2). Nosso resultado numérico contribuiu a recente q-generalização analítica de um TLC consistente com a mecânica estatística não-extensiva (do qual nosso modelo é um caso especial). Discutimos a dependência da entropia em função do tamanho do sistema e do índice q. Verificamos que a entropia correta (por ter uma taxa de produção de entropia finita) é S_{BG} . Isto indica que este tipo de correlações globais muda de fato o atrator das distribuições emergentes, mas não são suficientemente fortes para mudar o índice q na entropia. Neste contexto, existem atualmente esforços que indicam a possibilidade de impor correlações globais mais fortes, onde a taxa de crescimento da entropia só é finita para $q \neq 1$. Esta possibilidade, e sua relação com o formalismo da mecânica estatística não-extensiva é claramente uma linha de pesquisa a ser estudada e que pode esclarecer a ubiqüidade de distribuições tipo lei de potência observadas em um sem-número de fenômenos naturais.

7.2 Sistemas dinâmicos com interações de longo alcance

Sistema simplético de N mapas standard globalmente acoplados

Apresentamos um novo modelo de mapas globalmente acoplados, onde o acoplamento é simplético nas coordenadas, de modo a estabelecer uma relação com modelos Hamiltonianos com interações de longo alcance, em particular, o modelo α -XY.

Estudamos a evolução da temperatura dinâmica para uma parte do espaço de parâmetros. Observamos, para certas condições iniciais, a presença de estados meta-estáveis ou quaseestacionários, que para tamanhos finitos do sistema, relaxam depois de certo tempo t_c ao valor de equilíbrio pelo formalismo de BG. O escalamento do tempo de relaxação com o tamanho do sistema é $t_c \sim N^{\beta(\alpha)}$, onde $\beta(\alpha) \approx 0$ quando $\alpha \gtrsim 1$, e $\beta(\alpha) > 0$ quando $0 \leq \alpha \lesssim 1$, e portanto divergindo quando $N \to \infty$. Esta é uma característica que apresenta o modelo Hamiltoniano α -XY, e é um conceito chave para entender a correta descrição destes estados, um dos principais objetivos da mecânica estatística não-extensiva.

Consideramos também a sensibilidade às condições iniciais, estudando o máximo coeficiente de Lyapunov λ_M em função dos distintos parâmetros do sistema: o tamanho N, o parâmetro não-linear a e a constante de acoplamento b. Observamos que neste modelo, assim como no modelo Hamiltoniano α -XY, os λ_M também tendem a zero quando as interações são de longo alcance e, no caso de curto alcance, λ_M permanece finito, indicando um comportamento fortemente caótico. Mais precisamente, encontramos que, quando Naumenta, λ_M desaparece como $N^{-\kappa(\alpha)}$ onde $\kappa(\alpha) > 0$ quando $0 \le \alpha \lesssim 1$, e $\kappa \approx 0$ quando $\alpha \gtrsim 1$. Esta dependência em particular é a mesma que se encontra no modelo Hamiltoniano α -XY. No limite termodinâmico, este comportamento corresponde ao chamado caos fraco, que é uma das características mais estudadas pela mecânica estatística não-extensiva e é também onde tem-se encontrado evidências mais fortes da sua aplicabilidade [55].

Nossa conclusão principal é que a falta de ergodicidade deste modelo parece estar relacionada com certo confinamento não trivial (talvez multifractal) no espaço de fases que se agudiza para certos limites como o termodinâmico $N \to \infty$. As similaridades deste modelo de mapas acoplados com o modelo Hamiltoniano α -XY sugerem que ambos sistemas poderiam ter comportamentos dinâmicos comuns. A mecânica estatística nãoextensiva descreve claramente a dinâmica de mapas de baixas dimensões no limiar do caos. Portanto, nosso modelo é um excelente candidato para esclarecer os possíveis vínculos entre este tipo de dinâmica e a de sistemas Hamiltonianos que apresentam anomalias similares.

Hamiltoniano de Campo Médio

Nosso objetivo no estudo deste sistema é esclarecer as observações de difusão anômala que tem se exibido recentemente na literatura [75]. O trabalho que aqui apresentamos concentra-se fundamentalmente em dois aspectos da dinâmica: a evolução da difusão dos ângulos dos rotores e a forma funcional da distribuição destas variáveis.

Nossos resultados não descartam a possibilidade de uma correta descrição por parte da mecânica estatística não-extensiva dos estados meta-estáveis do HCM. Simplesmente indicam que assim como no limite termodinâmico o sistema fica confinado nos estados meta-estáveis, o processo difusivo se normaliza. Resultados confirmando este fato seriam muito importantes. Por outro lado, fica também em aberto qual é o verdadeiro mecanismo de formação das distribuições q-Gaussianas, podendo mesmo ser originadas pela não-extensividade do sistema. Este seria um resultado muito relevante já que implicaria que um sistema Hamiltoniano de longo alcance preparado fora do equilíbrio mostra sinais de não-extensividade mesmo com alguns observáveis (como a temperatura) exibindo o valor de equilíbrio de BG, indicando que este não seria um verdadeiro equilíbrio.

Princípio zero em estados quase-estacionários no HCM

Tendo em mente uma abordagem mais relacionada à termodinâmica dos estados quaseestacionários no modelo HCM, fizemos dois experimentos numéricos com o objeto de investigar a validade do princípio zero da termodinâmica. A motivação desta abordagem é evidente, para propôr uma descrição mecânico-estatística generalizada para estes estados é fundamental saber da validade do princípio zero da termodinâmica.

O nosso primeiro experimento consistiu em analisar um ensemble canônico definido numericamente como uma (pequena) parte de um ensemble microcanônico (sistema com energia total constante). Com efeito, integramos simpleticamente as equações de movimento de um sistema de N rotores e observamos as propriedades termodinâmicas em um subsistema de M rotores, onde $N \gg M \gg 1$. Na análise da energia cinética média específica (temperatura dinâmica), nossos resultados mostram que qualquer subconjunto de elementos atinge, depois de um tempo, a temperatura do estado quase-estacionário. Este resultado é equivalente ao princípio zero no seguinte sentido: considere-se o subsistema de M elementos com maior (menor) energia total como sendo o sistema A(B). Considere-se o resto do sistema (os elementos que não pertencem nem a A nem a B como o sistema C. Claramente os três sistemas estão em contato térmico já que há troca de momento. O sistema A(B) está em equilíbrio com o sistema C (já tem a mesma temperatura T_{EQE}), e os sistemas A e B permanecem em equilíbrio entre eles. Este é o princípio zero da termodinâmica mas, notavelmente, a temperatura comum entre os sistemas é a temperatura de meta-equilíbrio T_{EQE} . Este primeiro resultado indica que possivelmente o princípio zero da termodinâmica tenha uma validade maior à estritamente de equilíbrio normalmente associada à mecânica estatística de BG.

Nosso segundo experimento põe em contato dois sistemas diferentes, sendo o primeiro sistema igual ao microcanônico definido anteriormente (que agora chamaremos termostato). O segundo sistema consiste em um número M (novamente $N \gg M \gg 1$) de rotores com interações de curto alcance que chamaremos termômetro. Preparamos o termostato no estado quase-estacionário, enquanto preparamos o termômetro no equilíbrio de BG com

certa temperatura escolhida previamente. Em um determinado tempo (dentro do estado quase-estacionário) ambos sistemas são "conectados" através de um acoplamento de modo a ter uma energia de interação desprezível em relação a energia total dos sistemas. Nossos resultados mostram que o termômetro relaxa à temperatura do estado quase-estacionário, quando a temperatura do termômetro é menor que a do termostato e permanece assim boa parte da duração do platô. No caso em que a temperatura do termômetro é maior que a do termostato, o resultado é negativo; a temperatura do termômetro não relaxa à do termostato, se não que relaxa diretamente à T_{BG} do sistema composto. Apresentamos uma conjectura na qual explicamos que muito provavelmente isto seja por causa do tamanho finito do sistema. Com efeito, as flutuações de energia do termômetro seriam grandes demais a respeito da energia total dele, não permitindo a estabilização na T_{EQE} . Fica em aberto para esclarecimento este importante ponto, onde (em princípio) tem de se aumentar o suficiente o tamanho de ambos sistemas para neutralizar este efeito. Acreditamos que estes resultados possam ajudar a estabelecer os fundamentos de futura pesquisa no tema.

Fundamentação dinâmica do ensemble canônico

Na mesma linha do estudo numérico do ensemble canônico realizado no caso do estudo do princípio zero, abordamos o mesmo ensemble a partir de um outro ponto de vista: o estudo das flutuações de energia. Usamos o formalismo padrão de BG utilizando ferramentas numéricas comuns, introduzimos um novo cálculo que permite a comparação entre dinâmica Newtoniana não-linear e mecânica estatística no ensemble canônico. Implementando uma configuração padrão ($N \gg M \gg 1$ como anteriormente), mostramos que a distribuição de energias no espaço Γ de Gibbs concorda com as obtidas dinamicamente integrando as equações de Hamilton para condições iniciais próximas ao equilíbrio e fazendo médias de ensemble. Checamos este resultado em dois modelos paradigmáticos com interações de *curto* alcance, o modelo de rotores clássicos com acoplamento de primeiros vizinhos e o modelo β -FPU. Em relação às médias dinâmicas no tempo, temos confirmado as predições de BG para energias moderadamente baixas. No modelo XY em altas energias, se a escala

de tempo não é muito grande, as médias de tempos finitos não concordam com as médias de ensemble como conseqüência de um aumento da escala de tempo de flutuações típicas de energia. A dependência de energia desta discrepância não mostra correlação com a dependência do máximo coeficiente de Lyapunov (veja também [128]).

A principal conclusão do trabalho aqui apresentado é que mostramos que a estatística de termoequilíbrio provém da dinâmica (de precisão finita, ou seja, com flutuações devidas a erros numéricos), até para sistemas em contato com um termostato (caso que usualmente se discute com técnicas como Monte Carlo ou Nosé-Hoover, que não *deduzem* a distribuição de equilíbrio, e sim a impõem [132]).

Com efeito, se lembrarmos que a densidade de estado é um conceito puramente mecânico, pode-se ver que o que se obteve dinamicamente é o próprio fator de Boltzmann (Fig. 5.3). O cálculo que aqui apresentamos oferece uma possível linha de pesquisa para a fundamentação dinâmica da mecânica estatística, conceito ao que os mesmos fundadores (entre eles o próprio Einstein [175]) deram muita relevância e que ainda hoje muitos autores continuam analisando [6, 130, 128, 26, 131, 36]. Por outro lado, é indubitável que este tipo de cálculo pode ser uma ferramenta de utilidade na discussão de situações ainda mais complexas como no caso da mecânica estatística não-extensiva [75] onde existem discrepâncias dinâmicas com a teoria de BG, e onde se conjectura (como mostramos na seção 1.4 e também ao longo do trabalho) que a origem do expoente entrópico q deve ser dinâmica.

7.3 Sistemas estocásticos multifractais

Na última parte de nosso trabalho apresentamos resultados relacionados com sistemas financeiros. Este tipo de sistemas complexos sociais tem atraído interesse nos últimos anos, e são freqüentemente abordados a partir de um ponto de vista multidisciplinar.

Trabalhamos com dados reais, com séries temporais correspondentes ao índice Dow Jones 30. Mais precisamente, estudamos as propriedades estatísticas de volumes negociados e de retornos. Analisamos o grau de dependência usando uma generalização da medida de informação de Kullback-Leibler. Com este procedimento temos estudado a dependência entre variáveis em função do *lag* ou retardo, onde observa-se um decrescimento logarítmico. Comparando com a maneira tradicional de medir dependência através da função de correlação, verificamos que a dependência que surge pelo nosso método diminui muito mais lentamente. Isto indica que existem não-linearidades presentes na dinâmica de volumes negociados. Claramente muitos pontos podem ser ampliados neste modelo, por exemplo seria interessante usar cálculo perturbativo para uma determinação mais precisa de γ [152] e também pode se determinar a razão entre a escala da relaxação local e a atualização do volume negociado médio [154].

Por outro lado, exploramos as propriedades multifractais dos valores negociados calculando o espectro de singularidade $f(\varepsilon)$ numericamente aplicando o método MF-DFA.

Nossa principal conclusão é que a influência das correlações lineares na natureza multifractal do volume negociado é mínima, onde Δh_{cor} corresponde a 4% de Δh . Este valor é muito menor do que aquele que corresponde à influência de Δh_{nlin} de 30% de Δh .

Este resultado é compatível com a análise feita utilizando a medida de informação de Kullback-Leibler. Por outro lado, dos valores de Δh temos verificado que o fator mais importante no caráter multifractal do volume negociado e sua FDP não-Gaussiana $q - \Gamma$, com um peso de 66% em Δh . O cenário sugerido pelos nossos resultados é consistente com uma abordagem super-estatística, associada naturalmente com a mecânica não-extensiva.

Finalmente, apresentamos modelos explícitos para as dinâmicas estocásticas dos observáveis financeiros analisados ao longo desta parte do trabalho, o volume negociado e o lucro. Nosso objetivo é o de apresentar uma interpretação dinâmica para a emergência do índice q normalmente observado em análises numéricas de FDP de equações de Fokker-Planck em sistemas financeiros.

No caso da análise do lucro, o índice q está relacionado com o grau de reação dos agentes no mercado às flutuações deste observável, enquanto que, no caso do volume negociado, está associado às flutuações na sua média local. Dentro deste panorama dinâmico, verificamos que este índice aproximadamente verifica a relação dual $q_{stat} + q_{sens} = 2$, conjecturada previamente dentro da discussão do q-tripleto que caracteriza o estado estacionário, a sensibilidade às condições iniciais, e o relaxamento em sistemas não-extensivos. O estudo desta relação ainda é preliminar e a compreensão do seu significado não é completa. Por exemplo, uma nova questão surge em relação à relaxação e a conjectura do q-tripleto. É bem conhecido que as auto-correlações para o lucro são do tipo exponencial, em contraposição com as correlações duradouras da volatilidade (ou a magnitude do retorno) [192]. Esta última é também considerada um fato convencional e é compatível com a forma q-exponencial. Desta maneira, se a hipótese do mercado eficiente é considerada um elemento chave em mercados financeiros, então faz sentido assumir que $q_{rel} = 1$. Mas, se se considera que uma característica fundamental é a arbitragem nos mercados, então a relaxação essencial que deve ser levada em conta poderia ser relacionada à volatilidade, para a qual $q_{rel} > 1$. Claramente é necessário progredir nesta direção, tanto em um nível fundamental quanto nas possíveis aplicações, para poder alcançar uma compreensão mais profunda deste sistema complexo.

Apêndice A

Diagonalização da matriz de interação de longo alcance R_{ij}

Neste apêndice exibimos o cálculo analítico dos autovalores λ_n da matriz de distâncias R' [89].

Vamos considerar primeiro o caso d = 1, sem perda de generalidade. A matriz distância é definida

$$R'_{ij} = \begin{cases} r_{ij}^{-\alpha} & \text{se } i \neq j \\ b & \text{se } i = j \end{cases}$$
(A.1)

onde

$$r_{ij} = \min_{l \in \mathbb{Z}} |i - j + lN|.$$
(A.2)

Portanto, $R'_{ij} = R'(i-j) = R'(m)$ onde R' é uma função de período N. Esta periodicidade da rede nos permite diagonalizarR' no espaço de Fourier. Sua transformada de Fourier é

$$\tilde{R}'(n) = \sum_{m=1}^{N} \exp(-i\frac{2\pi}{N}nm)R'(m)$$
(A.3)

e sua inversa é

$$R'(j) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} \exp(-i\frac{2\pi}{N}jk)\tilde{R}'(k).$$
 (A.4)

Pode-se ver que $R'(i-j) = \sum_{k=1}^{N} u_{ik}^{\dagger} \lambda_l u_{jk}$ onde $u_{jk} := N^{-1/2} \exp(-i\frac{2\pi}{N}jk)$ é um elemento da matriz unitária de autovetores, com a seguinte expressão para os autovalores $(1 \le k \le N)$

$$\lambda_k = \sum_{m=1}^N \exp(-i\frac{2\pi}{N}km)R'(m). \tag{A.5}$$

Para qualquer rede d-dimensional, obteria-se uma expressão generalizada para $\lambda_n = \lambda (n_1, \ldots, n_d)$ onde $1 \le n_1, \ldots, n_d \le N^{1/d}$ da seguinte forma

$$\lambda_{\mathbf{n}} = \sum_{m_1=1}^{N^{1/d}} \dots \sum_{m_d=1}^{N^{1/d}} \exp\left(-i\frac{2\pi}{N^{1/d}}\sum_{i,j=1}^d n_i m_j\right) R'(\mathbf{m}).$$
(A.6)

Voltando ao caso de d = 1, daqui em diante vamos escolher N par e usaremos N = 2p. Como R' é uma função par, isto implica que, para $1 \le k \le N = 2p$,

$$\lambda_k = b + \tilde{\lambda}_k \tag{A.7}$$

com

$$\tilde{\lambda}_k := \frac{(-1)^k}{p^{\alpha}} + 2\sum_{m=1}^{p-1} \frac{\cos\left(\pi km/p\right)}{m^{\alpha}}.$$
(A.8)

 $\tilde{\lambda}_p$ é o menor dos $\tilde{\lambda}_k$ e é negativo. Com o objeto de obter um espectro completamente positivo que nos permita aplicar a transformada de Hubbard-Stratonovitch, podemos deslocar o espectro *escolhendo*

$$b := -\tilde{\lambda}_p = -\frac{(-1)^p}{p^{\alpha}} - 2\sum_{m=1}^{p-1} \frac{(-1)^m}{m^{\alpha}}.$$
 (A.9)

 \tilde{N} é então definido como o máximo autovalor

$$\tilde{N} = \lambda_{2p} = b + \frac{1}{p^{\alpha}} + 2\sum_{m=1}^{p-1} \frac{1}{m^{\alpha}}$$
(A.10)

e pode-se verificar que

$$\sum_{k=1}^{N=2p} \tilde{\lambda}_k = 0. \tag{A.11}$$

Apêndice B

Solução canônica de BG do modelo XY inercial unidimensional e do modelo β de Fermi-Pasta-Ulam

Neste apêndice revisitamos a solução canônica analítica de BG do dois modelos com interação entre primeiros vizinhos: o modelo inercial XY ferromagnético e do modelo β de Fermi-Pasta-Ulam [128].

B.1 Modelo XY

B.1.1 Primeiros vizinhos em d = 1

A Hamiltoniana do modelo XY é dada por

$$H_M = K_M + V_M = \sum_{i=1}^M \left[\frac{p_i^2}{2} + 1 - \cos(q_{i+1} - q_i) \right],$$
 (B.1)

onde $q_i \in [0, 2\pi), p_i \in \mathbb{R}$. Temos que calcular a função de partição

$$Z_M = \int \prod_{i=1}^M (dp_i dq_i) \exp\left[-\beta H_M(p_i, q_i)\right].$$
(B.2)

Já que estaremos interessados no limite termodinâmico $M \to \infty$, para evitar complicações formais usamos para este cálculo condições de contorno livres.

A integração sobre os momentos p_i é realizada trivialmente e fornece um fator

$$\left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{\frac{M}{2}},\tag{B.3}$$

onde $\beta \equiv 1/T \ (k_B \equiv 1)$.

Para calcular a integral das configurações, realizamos primeiro a seguinte transformação de coordenadas:

$$\begin{aligned}
\omega_1 &\equiv q_2 - q_1, \\
&\vdots \\
\omega_{M-1} &\equiv q_M - q_{M-1}, \\
\omega_M &\equiv \overline{q} - q_M, \\
&\overline{\omega} &\equiv \overline{q},
\end{aligned}$$
(B.4)

onde $\omega_i \in [0, 2\pi)$ e $\overline{\omega}, \overline{q}$ não são verdadeiras coordenadas, mas parâmetros. É fácil verificar que o determinante Jacobiano desta transformação é não-singular

$$\det\left(\frac{\partial(\omega_1\dots\omega_M\overline{\omega})}{\partial(q_1\dots q_M\overline{q})}\right) = 1. \tag{B.5}$$

A existência do limite termodinâmico para esta transformação de variáveis é verificada analisando a contribuição da coordenada $\overline{\omega}$ à energia livre. Com efeito temos

$$Z_{M} = \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{\frac{M}{2}} \int_{0}^{2\pi} \prod_{i=1}^{M} d\omega_{i} \exp\left[-\beta \sum_{i=1}^{M} (\cos \omega_{i})\right] \exp(-\beta M)$$
$$= \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{\frac{M}{2}} \exp(-\beta M) \left[I_{0}(\beta)\right]^{M} g(\overline{\omega}) (2\pi)^{M}, \tag{B.6}$$

onde I_0 é a função modificada de Bessel da primeira espécie de ordem zero, e g é uma função não especificada.

A energia livre específica

$$f_M = -\frac{1}{M\beta} \ln Z_M \tag{B.7}$$

é dada portanto por

$$f_M = -T \left[\frac{1}{2} \ln T + \ln I_0 \left(\frac{1}{T} \right) + \ln 2\pi^{\frac{3}{2}} \right] + 1 + O \left(\frac{1}{M} \right), \tag{B.8}$$

onde a contribuição $O\left(\frac{1}{M}\right)$, desprezível no limite termodinâmico, vem da função $g(\overline{\omega})$.

Invertendo a relação que define a energia específica,

$$e = \frac{\partial(\beta f)}{\partial\beta},\tag{B.9}$$

obtemos a curva calórica T(e).

B.1.2 Alcance infinito

Passamos agora a analisar o caso do modelo Hamiltoniano dito de campo médio (veja, por exemplo, [88]). A Hamiltoniana é dada por

$$H = K + V = \sum_{i=1}^{M} \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2M} \sum_{i,j=1}^{M} [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)],$$
(B.10)

onde $\theta_i \in [0, 2\pi)$ e $p_i \in \mathbb{R}$. Temos que calcular a função de partição

$$Z_{M} = \int \prod_{i=1}^{M} (dp_{i} dq_{i}) \exp\left[-\beta H_{M}(p_{i}, q_{i})\right],$$
(B.11)

 $\operatorname{com} \beta \equiv 1/T, \, k_B \equiv 1.$

A integração sobre os momentos p_i é realizada trivialmente e fornece um fator

$$\left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{\frac{M}{2}}.$$
(B.12)

A função de partição agora é dada por

$$Z_{M} = \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{\frac{M}{2}} \int_{0}^{2\pi} \prod_{i=1}^{M} d\theta_{i} \exp\left[-\frac{\beta}{2M} \sum_{i,j=1}^{M} \cos(\theta_{i} - \theta_{j})\right] \exp\left(-\frac{\beta M}{2}\right)$$
$$= C \int_{0}^{2\pi} \prod_{i=1}^{M} d\theta_{i} \exp\left[-\frac{\beta}{2M} \sum_{i,j=1}^{M} \cos(\theta_{i} - \theta_{j})\right], \qquad (B.13)$$

com

$$C \equiv \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{\frac{M}{2}} \exp\left(-\frac{\beta M}{2}\right). \tag{B.14}$$

Para calcular este integral, observamos primeiro a identidade

$$\sum_{i,j=1}^{M} \cos(\theta_i - \theta_j) = \left(\sum_{i=1}^{M} \cos\theta_i\right)^2 + \left(\sum_{i=1}^{M} \sin\theta_i\right)^2 = \left|\sum_{i=1}^{M} \mathbf{m}_i\right| = M^2 \mathbf{m}^2, \quad (B.15)$$

onde, lembramos,

$$\mathbf{m} \equiv \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} \mathbf{m}_{i}, \qquad \mathbf{m}_{i} \equiv [\cos(\theta_{i}), \sin(\theta_{i})].$$
(B.16)

Temos então

$$Z_M = C \int_0^{2\pi} \prod_{i=1}^M d\theta_i \exp\left(-\frac{\beta M}{2}\mathbf{m}^2\right).$$
(B.17)

Consideramos agora a identidade Gaussiana

$$\exp\left(\frac{\mu}{2}\mathbf{v}^{2}\right) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{w} \exp\left(-\mathbf{w}^{2} + \sqrt{2\mu} \mathbf{v}\mathbf{w}\right), \qquad (B.18)$$

onde ${\bf v}$ e ${\bf w}$ são vetores bidimensionais
e μ é positivo. Podemos portanto reescrever a função de partição como

$$Z_M = \frac{C}{\pi} \int_0^{2\pi} \prod_{i=1}^M d\theta_i \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{w} \exp\left(-\mathbf{w}^2 + \sqrt{2\mu} \mathbf{mw}\right), \qquad (B.19)$$

onde $\mu = \beta M$. Introduzindo a variável re-escalada $\mathbf{w} \to \mathbf{w}\sqrt{M/(2\beta)}$ e trocando a ordem de integração obtemos

$$Z_{M} = \frac{MC}{2\pi\beta} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{w} \exp\left(-\frac{M\mathbf{w}^{2}}{2\beta}\right) \int_{0}^{2\pi} \prod_{i=1}^{M} d\theta_{i} \exp\left(\sum_{i=1}^{M} w_{x} \cos\theta_{i} + w_{y} \sin\theta_{i}\right)$$
$$= \frac{MC}{2\pi\beta} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{w} \exp\left\{-M\left[\frac{w^{2}}{2\beta} - \ln(2\pi I_{0}(w))\right]\right\}, \qquad (B.20)$$

onde I_0 é a função modificada de Bessel da primeira espécie de ordem zero e w é o módulo de **w**. Esta última integral pode ser avaliada com a técnica de ponto de sela, no limite termodinâmico $M \to \infty$. Neste limite, a energia livre de Helmholtz específica

$$f = -\lim_{M \to \infty} \frac{1}{M\beta} \ln Z_M, \tag{B.21}$$

é dada portanto por

$$f = \frac{1}{2} - \frac{1}{\beta} \left\{ \frac{1}{2} \ln\left(\frac{2\pi}{\beta}\right) - \max_{w} \left[\frac{w^2}{2\beta} - \ln(2\pi I_0(w))\right] \right\},\tag{B.22}$$

com a condição de máximo que leva para esta equação de consistência:

$$\frac{w}{\beta} = \frac{I_1(w)}{I_0(w)},\tag{B.23}$$

onde I_0 é a função modificada de Bessel da primeira espécie da ordem 1.

A Eq.(B.23) é análoga, para o modelo XY inercial, à equação de Curie-Weiss obtida resolvendo o modelo de Ising na aproximação de campo médio. Para $\beta \leq \beta_c \equiv 2$, a equação apresenta somente a solução $\overline{w} = 0$, que é instável. Para $\beta \geq \beta_c$, ou seja, abaixo da temperatura crítica $T_c = 0.5$, duas novas soluções estáveis simétricas aparecem através de uma bifurcação de forquilha, e é presente uma descontinuidade na derivada segunda da energia livre, indicando uma transição de segunda ordem.

Este resultado é confirmado por uma análise do parâmetro de ordem¹

$$m = \frac{I_1(\overline{w})}{I_0(\overline{w})}.\tag{B.24}$$

A magnetização se anula de maneira contínua em β_c . Já que a magnetização mede o grau de agregamento das partículas, temos uma transição de uma fase agregada quando $\beta > \beta_c$, para uma fase homogênea quando $\beta < \beta_c$. O expoente que caracteriza o comportamento da magnetização perto do ponto crítico vale 1/2, como esperado para um modelo de campo médio [80].

Através da relação que define a energia específica

$$e = \frac{\partial(\beta f)}{\partial\beta},\tag{B.25}$$

temos

$$e = \frac{1}{2\beta} + \frac{1}{2}(1 - m^2). \tag{B.26}$$

Invertendo esta relação obtemos a curva calórica representada na Fig. B.1.

¹Isto é realizado adicionando ao Hamiltoniano um campo externo e considerando a derivada da energia livre em relação a este campo, calculada para campo nulo.



Figura B.1: Curva calórica obtida da solução analítica de *ensemble* canônico de BG do modelo inercial XY ferromagnético com interação de alcance infinito.

B.2 Modelo β de Fermi-Pasta-Ulam

No caso do modelo β de Fermi-Pasta-Ulam com interação entre primeiros vizinhos, a Hamiltoniana é dada por

$$H_M = K_M + V_M = \sum_{i=1}^M \left[\frac{p_i^2}{2} + \frac{(q_{i+1} - q_i)^2}{2} + \lambda \frac{(q_{i+1} - q_i)^4}{4} \right],$$
 (B.27)

onde $q_i, p_i \in \mathbb{R},$ e queremos calcular a função de partição

$$Z_M = \int \prod_{i=1}^M (dp_i dq_i) \exp\left[-\beta H_M(p_i, q_i)\right], \qquad (B.28)$$

onde, novamente, $\beta \equiv 1/T$ ($k_B \equiv 1$), e usamos para este cálculo condições de contorno livres.

A integração sobre os momentos p_i é realizada trivialmente e fornece um fator

$$\left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{\frac{M}{2}}.\tag{B.29}$$

Solução canônica de BG do modelo XY inercial unidimensional e do modelo β 152 de Fermi-Pasta-Ulam

Para calcular a integral das configurações realizamos a mesma transformação de coordenadas do apêndice B.1.1:

$$\varphi_{1} \equiv q_{2} - q_{1},$$

$$\vdots$$

$$\varphi_{M-1} \equiv q_{M} - q_{M-1},$$

$$\varphi_{M} \equiv \overline{q} - q_{M},$$

$$\overline{\varphi} \equiv \overline{q},$$
(B.30)

onde $\overline{\varphi} \in \overline{q}$ são parâmetros, e o determinante Jacobiano é igual a 1. Temos então

$$Z_{M} = \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{\frac{M}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{i=1}^{M} d\varphi_{i} \exp\left[-\beta \sum_{i=1}^{M} \left(\frac{\varphi_{i}^{2}}{2} + \lambda \frac{\varphi_{i}^{4}}{4}\right)\right]$$
$$= \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{\frac{M}{2}} \left\{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \left(\frac{\beta\lambda}{2}\right)^{-\frac{1}{4}} \exp\left(\frac{\beta}{8\lambda}\right) D_{-\frac{1}{2}} \left[\left(\frac{\beta}{2\lambda}\right)^{\frac{1}{2}}\right]\right\}^{M} f(\overline{\varphi}), (B.31)$$

onde Γ é a função gama de Euler, $D_{-\frac{1}{2}}$ é uma função cilíndrica parabólica, ef é uma função não especificada.

A energia livre específica

$$f_M = -\frac{1}{M\beta} \ln Z_M \tag{B.32}$$

é dada portanto por

$$f_{M} = -\frac{1}{2}T\ln(2\pi T) - T\ln\left[\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\right] + \frac{1}{4}T\ln\left(\frac{\lambda}{2T}\right) + -T\ln\left\{D_{-\frac{1}{2}}\left[\left(\frac{1}{2\lambda T}\right)^{\frac{1}{2}}\right]\right\} - \frac{1}{8\lambda} + O\left(\frac{1}{M}\right), \quad (B.33)$$

onde a contribuição $O\left(\frac{1}{M}\right)$, desprezível no limite termodinâmico, vem da função $f(\overline{\varphi})$.

Invertendo a relação que define a energia específica,

$$e = \frac{\partial(\beta f)}{\partial\beta},\tag{B.34}$$

obtemos a curva calórica T(e).

Bibliografia

- Boltzmann L., Sitzb. Akad. Wiss. Wien 76, 373 (1877); Wissenschaftliche Abhandlungen von Ludwig Boltzmann, Vol. II, ed. F. Hasenöre, Chelsea, New York (1968) p.164;
 L. Boltzmann, Lectures on Gas Theory, Dover, New York (1995); J. W. Gibbs, On the Equilibrium of Heterogeneous Substances, Connecticut Acad. Sci., Connecticut (1875-78), reimpresso em The Scientic Papers of J. Willard Gibbs, Dover, New York (1961); J. W. Gibbs, Elementary Principles in Statistical Mechanics, Yale University Press, New Haven (1902), reimpresso em The Collected Works of J. Willard Gibbs, Dover, New York (1960).
- [2] C. Tsallis, J. Stat. Phys. 52, 479 (1988). Para um review recente ver [137]; Para uma bibliografia atualizada ver http://tsallis.cat.cbpf.br/biblio.htm
- [3] E.M.F. Curado e C. Tsallis, J. Phys. A 24, L69 (1991); Corrigenda: 24, 3187 (1991) e
 25, 1019 (1992).
- [4] C. Tsallis, R.S. Mendes e A.R. Plastino, Physica A 261, 534 (1998).
- [5] G. L. Ferri, S. Martínez e A. Plastino, J. Stat. Mech. P04009 (2005). Ver também [3] e [4].
- [6] S. Salinas, Introdução à Física Estatística, Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo (1999).
- [7] C. Beck, G.S. Lewis e H.L. Swinney, Phys. Rev. E 63, 035303 (2001); C. Beck, Physica A 295, 195 (2001);

- [8] C. Beck, Phys. Rev. Lett. 87, 180601 (2001).
- C. Beck e F. Schlogl, Thermodynamics of Chaotic Systems, Cambridge University Press, UK (1993).
- [10] Feller, An Introduction to Probability Theory and Its Applications, 2, John Wiley and Sons, New York (1971).
- [11] A.-L. Barabási, *Linked: The New Science of Networks*, Perseus, Cambridge, MA (2002);
- [12] D. J. Watts, and S. H. Strogatz, Nature **393**, 440 (1998).
- [13] Hilfer R., Metzler R., Blumen A. e Klafter J., eds., Strange Kinetics, Chem. Phys. 284 (2002).
- [14] S. M. Stigler, Statistics on the table the history of statistical concepts and methods, Harvard University Press, Cambridge (1999) 284.
- [15] D. Prato e C. Tsallis, Phys. Rev. E **60**, 2398 (1999).
- [16] M. Bologna, C. Tsallis e P. Grigolini, Phys. Rev. E 62, 2213 (2000); C. Tsallis, C. Anteneodo, L. Borland e R. Osorio, Physica A 324, 89 (2003); C. Tsallis, Physica D 193, 3 (2004).
- [17] C. Tsallis, Milan Journal of Mathematics 73, 145 (2005).
- [18] H. B. Callen, Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics, 2^{da} Edição, John Wiley and Sons, New York, (1985).
- [19] Polya G., Mathematical Discovery, 1, John Wiley and Sons, New York (1962) 88.
- [20] L. Nivanen, A. Le Mehaute e Q. A. Wang, Rep. Math Phys 52, (2003) 437; E. P. Borges, Physica A 340, (2004) 95.

BIBLIOGRAFIA

- [21] H. Suyari e M. Tsukada, IEEE Transaction on Information Theory 51, (2005) 753; H. Suyari, Mathematical structure derived from the q-multinomial coefficient in Tsallis statistics, a ser publicado em Physica A, eprint [cond-mat/0401541]; H. Suyari, q-Stirling's formula in Tsallis statistics, a ser publicado em Physica A, eprint [cond-mat/0401546];
- [22] Anteneodo C., Physica A, **358** 289 (2005);
- [23] Livraria MAPM para linguagem C.
- [24] F. D. Nobre e C. Tsallis, Physica A 213, 337 (1995); A. R. Plastino e A. Plastino, Physica A 222, 347 (1995); Ion D.B. e Ion M.L.D., Phys. Rev. Lett. 81, 5714 (1998); Naudts J., Chaos, Solitons and Fractals 13, 445 (2002); Robledo A., Physica D 193, 153 (2004); Wada T. e Scarfone A.M., Phys. Lett. A 335, 351 (2005); Mayoral E. e Robledo A., Phys. Rev. E, 72, 026209 (2005). Ver também Jund P., Kim S.G. e C. Tsallis, Phys. Rev. B 52, 50 (1995) (Eq. (7)); [123] e [4].
- [25] M.L.D. Ion e D.B. Ion, Phys. Lett. B 482, 57 (2000); D.B. Ion e M.L.D. Ion, Phys. Lett. B 519, 63 (2001);
- [26] D. Escande, H. Kantz, R. Livi e S. Ruffo, J. Stat. Phys. 76, 605 (1994).
- [27] C. Tsallis, A.R. Plastino e W.-M. Zheng, Chaos, Solitons and Fractals 8, 885 (1997).
- [28] C. Tsallis, Braz. J. Phys. **29**, Número 1 (1999);
- [29] G. Wilk e Z. Włodarczyk, Phys. Rev. Lett. 84, 2770 (2000).
- [30] B.V. Gnedenko e A. N. Kolmogorov), Limit Distributions for Sums of Independent Random Variables Addison-Wesley Publ. Co., Cambridge, Massachusetts (1954).
- [31] L. Arnold, Stochastic Differential Equations: Theory and Applications, Wiley, Interscience Publication, John Wiley and Sons, New York (1974).
- [32] C. Tsallis e A.M.C. Souza, Phys. Rev. E 67, 026106 (2003); A.M.C. Souza e C. Tsallis,
 Phys. Lett. A 319, 273 (2003).

- [33] P. Grassberger e M. Scheunert, J. Stat. Phys. 26, 697 (1981); T. Schneider, A. Politi e D. Wurtz, Z. Phys. B 66, 469 (1987); G. Anania e A. Politi, Europhys. Lett. 7, 119 (1988) e H. Hata, T. Horita e H. Mori, Progr. Theor. Phys. 82, 897 (1989).
- [34] G.F. Añaños, F. Baldovin e C. Tsallis., Eur. Phys. J. B 46, 409 (2005).
- [35] C. Tsallis, E.P. Borges e F. Baldovin, Physica A **305**, 1 (2002).
- [36] K. Huang, Statistical Mechanics (J. Wiley and Sons, New York, 1987), p. 90-91 [" We mentioned the ergodic theorem in Section 3.4, but did not use it as a basis for the microcanonical ensemble, even though, on the surface, it seems to be the justification we need. The reason is that existing proofs of the theorem all share (...) an avoidance of dynamics. For this reason, they cannot provide the true relaxation time for a system to reach local equilibrium (typically about 10⁻¹⁵ s for real systems), but have a characteristic time scale of the order of the Poincaré cycle. For this reason, the ergodic theorem has so far been an interesting mathematical exercise irrelevant to physics."].
- [37] A.I. Kinchin, Mathematical Foundations of Information Theory, (Dover, New York 1957) e Mathematical Foundations of Statistical Mechanics, Dover, New York, (1960).
- [38] Nonextensive Statistical Mechanics and Thermodynamics, editado por S.R.A. Salinas e C. Tsallis, Braz. J. Phys. 29, Número 1 (1999); Nonextensive Statistical Mechanics and its Applications, editado por S. Abe e Y. Okamoto, Lecture Notes in Physics 560 (Springer-Verlag, Heidelberg 2001); Non-Extensive Thermodynamics and Physical Applications, editado por G. Kaniadakis, M. Lissia, e A. Rapisarda, Physica A 305, (2002); Classical and Quantum Complexity and Nonextensive Thermodynamics, editado por P. Grigolini, C. Tsallis e B.J. West, Chaos, Solitons and Fractals 13, Número 3 (2002); Nonadditive entropy and nonextensive statistical mechanics, edited by M. Sugiyama, Continuum Mechanics and Thermodynamics 16, Springer-Verlag, Heidelberg (2004); Anomalous Distributions, Nonlinear Dynamics and Nonextensivity, editado por H. L. Swinney e C. Tsallis, Physica D 193 (2004); Trends and Perspectives in Extensive and

BIBLIOGRAFIA

Non-Extensive Statistical Mechanics, editado por H. Herrmann, M. Barbosa e E. Curado, Physica A **344**, Issue 3/4 (2004); Ver também Refs. [137], [172], [140] e [173].

- [39] F. C. Alcaraz, C. Tsallis, Phys. Lett. A **301**, 105 (2002).
- [40] V. Latora, M. Baranger, A. Rapisarda e C. Tsallis, Phys. Lett. A 273, 97 (2000).
- [41] F.D. Nobre e C. Tsallis, Phys. Rev. E 68, 036115 (2003).
- [42] F.D. Nobre e C. Tsallis, Physica A **344**, 587 (2004).
- [43] E.P. Borges e C. Tsallis, Physica A **305**, 148 (2002).
- [44] S.A. Cannas e F.A. Tamarit, Phys. Rev. B 54, R12661 (1996).
- [45] N.S.Krylov Works on the Foundations of Statistical Physics, traduzido por A.B. Migdal, Ya. G. Sinai e Yu. L. Zeeman, Princeton University Press (1979); Nature 153, 709 (1944).
- [46] E. Ott, Chaos in dynamical systems Cambridge University Press, Cambridge (1993).
- [47] A.M. Ozorio de Almeida, Sistemas Hamiltonianos: Caos E Quantização Unicamp, Campinas, (1991).
- [48] A.M. Ozorio de Almeida, R. O. Vallejos, Chaos, Solitons and Fractals 11, (2000) 1015;
- [49] G.M. Zaslavsky, R.Z. Sagdeev, D.A. Usikov e A.A. Chernikov, Weak chaos and quasiregular patterns Cambridge University Press, Cambridge (1991).
- [50] G.M. Zaslavsky, Phys. Rep. **371**, 461 (2002).
- [51] G.M. Zaslavsky e B.A. Niyazov, Phys. Rep. 283, 73 (1997).
- [52] R.S. Mackay, J.D. Meiss e I.C. Percival, Physica D 13, 55 (1984).
- [53] B.V. Chirikov Phys. Rep. **52**, 263 (1979).

- [54] C. Tsallis, A. Rapisarda, V. Latora e F. Baldovin, em Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long-Range Interactions, eds. T. Dauxois, S. Ruffo, E. Arimondo e M. Wilkens Lecture Notes in Physics 602, 140, Springer, Berlin (2002).
- [55] F. Baldovin e A. Robledo, Phys. Rev. E 66, 045104(R) (2002); F. Baldovin e A. Robledo, Phys. Rev. E 69, 045202(R) (2004); F. Baldovin e A. Robledo, Europhys. Lett. 60, 518 (2002). See also E. Mayoral e A. Robledo, Physica A 340, 219 (2004), E. Mayoral e A. Robledo, Phys. Rev. E 72, 026209 (2005), e H. Hernandez-Saldana e A. Robledo, a ser publicado pela Phys. Rev. E (2006) *eprint* [cond-mat/0507624]. A. Robledo, Europhys. News 36, 6 (2005).
- [56] A. Robledo, Phys. Lett. A 328, (2004) 467; F. Baldovin e A. Robledo, Phys. Rev. E 72, (2005) 066213.
- [57] F. A. B. F. de Moura, U. Tirnakli e M. L. Lyra, Phys. Rev. E 62, (2000) 6361.
- [58] U. Tirnakli, C. Tsallis e M.L. Lyra, Eur. Phys. J. B 11, 309 (1999); U. Tirnakli, C. Tsallis e M.L. Lyra, Phys. Rev. E 65, 036207 (2002). U. Tirnakli, Phys. Rev. E 66, 066212 (2002); U. Tirnakli, Physica A 305, 119 (2002); Ver também [59].
- [59] E. P. Borges e U. Tirnakli, Physica D 193, 148 (2004); E. P. Borges e U. Tirnakli, Physica A 340, 227 (2004);
- [60] L.G. Moyano, C. Tsallis e M. Gell-Mann, Europhys. Lett. **73**, 813 (2006).
- [61] J.A. Marsh, M.A. Fuentes, L.G. Moyano e C. Tsallis, Influence of global correlations on central limit theorems and entropic extensivity, submetido a Physica A (2006).
- [62] J. de Souza, L.G. Moyano e S.M. Duarte Queirós, a ser publicado pela Eur. Phys. J. B (2006), preprint [physics/0510112].
- [63] L.G. Moyano, J. de Souza e S.M. Duarte Queirós, sunmetido a Physica A (2006), preprint [physics/0512240].

- [64] S.M. Duarte Queirós, L.G. Moyano, J. de Souza e C. Tsallis, a ser publicado pela Eur. Phys. J. B (2006), preprint [physics/0601222].
- [65] F. Baldovin, L.G. Moyano, A.P. Majtey, A. Robledo e C. Tsallis, Physica A 340, 205 (2004). F. Baldovin em Ref. [137].
- [66] L.G. Moyano, A.P. Majtey e C. Tsallis, *Complexity, Metastability and Nonextensivity*, editado por C. Beck, G. Benedek, A. Rapisarda e C. Tsallis World Scientific, Singapore, 2005) 123.
- [67] L. G. Moyano, A. P. Majtey, C. Tsallis, Weak chaos and metastability in a symplectic system of many long-range-coupled standard maps, submetido a Eur. Phys. J. B. (2006); ver também Ref. [66].
- [68] F. Baldovin, L.G. Moyano e C. Tsallis, submetido a Eur. Phys. J. B [cond-mat/0402635] (2005).
- [69] L. G. Moyano e C. Anteneodo, On the diffusive anomalies in a long-range Hamiltonian system, submetido a Phys. Rev. E, [condmat/0601518] (2006).
- [70] Marcio P. de Alburquerque, Marcelo P. de Albuquerque, L.G. Moyano e C. Tsallis, projeto de Simulação em paralelo sobre Grid no National Center for Supercomputing Applications (NSCA), em andamento (2006); ver também [71].
- [71] L.G. Moyano, F. Baldovin, e C. Tsallis, Zeroth principle of thermodynamics in aging quasistationary states, submetido a Eur. Phys. J. B, [cond-mat/0305091].
- [72] L. G. Moyano, G. Abramson, D. H. Zanette, Eur. Phys. J. B 22, 223 (2001).
- [73] S. Umarov, S. Steinberg, C. Tsallis, A generalization of the central limit theorem consistent with nonextensive statistical mechanics, [condmat/0603593] (2006).
- [74] G. Casati, C. Tsallis e F. Baldovin, Europhys. Lett. **72**, 355 (2005).
- [75] V. Latora e M. Baranger, Phys. Rev. Lett. 82, 520 (1999).

- [76] F. Baldovin, E. Brigatti e C. Tsallis, Phys. Lett. A **320**, 254 (2004).
- [77] M. Kac, G. Uhlenbeck e P.C. Hemmer, J. Math. Phys. 4, 216 (1963).
- [78] V. Ahlers, R. Zillmer, e A. Pikovsky, Phys. Rev. E 63, 036213 (2001).
- [79] T. Konishi e K. Kaneko, J. Phys. A 25, 6283 (1992); K. Kaneko e T. Konishi, Physica D 71, 146 (1994).
- [80] M. Antoni e S.Ruffo, Phys. Rev. E 52, 2361 (1995); A. Campa, A. Giansanti e D. Moroni, Phys. Rev. E 62, 303 (2000); ver também [82], [83], [84], [85], [86], [87] e [89].
- [81] A. Giansanti, D. Moroni e A. Campa, Chaos, Sol. & Frac. 13, 407 (2002);
- [82] V. Latora, A. Rapisarda e S. Ruffo, Phys. Rev. Lett. 80, 692 (1998); Physica D 131, 38 (1999); Progr. Theor. Phys. Suppl. 139, 204 (2000).
- [83] B.J.C. Cabral e C. Tsallis, Phys. Rev. E 66, 065101(R) (2002).
- [84] F. Tamarit e C. Anteneodo, Phys. Rev. Lett. 84, 208 (2000).
- [85] C. Anteneodo e C. Tsallis, Phys. Rev. Lett. 80, 5313 (1998);
- [86] C. Anteneodo e R.O. Vallejos, Phys. Rev. E 65, 016210 (2002); R.O. Vallejos e C. Anteneodo, Phys. Rev. E 66, 021110 (2002); R.O. Vallejos e C. Anteneodo, Physica A 340, 178 (2004).
- [87] V. Latora, A. Rapisarda e S. Ruffo, Physica A 280, 81 (2000); ver também [112].
- [88] T. Dauxois, V. Latora, A. Rapisarda e S. Ruffo em Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long-Range Interactions, eds T. Dauxois, S. Ruffo, E. Arimondo e M. Wilkens Lecture Notes in Physics 602, 140, Springer, Berlin, (2002).
- [89] M.-C. Firpo e S. Ruffo, J. Phys. A 34, L511 (2001); D. Moroni, Dynamics and thermodynamics of a variable-range interacting XY model, M. Sc. Thesis, University La Sapienza, Rome, Italy (2000).

BIBLIOGRAFIA

- [90] M.-C. Firpo, Phys. Rev. E 57, 6599 (1998).
- [91] G. Benettin, L. Galgani, A. Giorgilli e J.M. Strelcyn, Meccanica 15, 21 (1980).
- [92] C. Anteneodo, Phys Rev E **69**, 016207 (2004).
- [93] Esta é uma conseqüência do teorema de Oseledec que estabelece que, assumindo ergodicidade, (quase) qualquer crescimento exponencial tende a um valor assintotico λ₀, independentemente da orbitae para (quase) todas as condições iniciais. Ver por exemplo, V.I. Oseledec, Trans. Mosc. Math. Soc. **19**, 197 (1968); J.-P. Eckmann e D. Ruelle, Rev. Mod. Phys. **57**, 617 (1985).
- [94] G.M. Zaslavsky, R.Z. Sagdeev, D.A. Usikov e A.A. Chernikov, Weak chaos and quasiregular patterns Cambridge University Press, Cambridge (1991).
- [95] B.V. Chirikov, Phys. Rep. 52, 263 (1979).
- [96] A. Pluchino, V. Latora, A. Rapisarda, Physica A **338**, 60 (2004).
- [97] C. Tsallis, Braz. J. Phys. **29**, 1 (1999).
- [98] M. Falcioni, U. Marini Bettolo Marconi e A. Vulpiani, Phys. Rev. A 44, 2263 (1991).
- [99] J.G. Berryman, J. Math. Phys. 18, 2108 (1977).
- [100] M.F. Shlesinger, J. Klafter e B.J. West, Physica A 140, 212 (1986).
- [101] M.F. Shlesinger, B.J. West e J. Klafter, Phys. Rev. Lett. 58, 1100 (1987).
- [102] H. Spohn, J. Phys. I (France) **3**, 69 (1993).
- [103] J. Stephenson, Physica A **222**, 234 (1995).
- [104] O.V. Bychuk e B. O'Shaughnessy, Phys. Rev. Lett. 74, 1795 (1995).
- [105] C.-K. Peng, J. Mietus, J.M. Hausdorff, S. Havlin, H.E. Stanley e A.L. Goldberger, Phys. Rev. Lett. 70, 1343 (1993).

[106] X. Yu e D.M. Leitner, J. Chem. Phys. 119 23, 12673 (2003).

- [107] T. Dauxois, S. Ruffo, E. Arimondo e M. Wilkens, eds., Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long Range Interactions, Lecture Notes in Physics Vol. 602 Springer (2002), e referenças contidas no volume.
- [108] V. Latora, A. Rapisarda, e C. Tsallis, Physica A 305, 129 (2002). ver também Ref.([82]);
- [109] A. Pluchino, V. Latora e A. Rapisarda, Physica A 340, 187 (2004); Phys. Rev. E 69, 056113 (2004).
- [110] M. A. Montemurro, F. A. Tamarit e C. Anteneodo, Phys. Rev. E 67, 031106 (2003).
- [111] A. Pluchino, V. Latora, e A. Rapisarda, Physica D **193**, 315 (2004).
- [112] V. Latora, A. Rapisarda e S. Ruffo, Phys. Rev. Lett. 83, 2104 (1999).
- [113] S. Abe e A. K. Rajagopal, Europhys. Lett., **52**, 610 (2000).
- [114] S. Abe e N. Suzuki, Phys. Rev. E 67, 016106 (2003). S. Abe e N. Suzuki, Europhys.
 Lett. 61, 852 (2002).
- [115] A. Taruya e M. Sakagami, Phys. Rev. Lett. 90, 181101 (2003). P.-H. Chavanis, Phys.
 Rev. E 68, 036108 (2003).
- [116] Y.Y. Yamaguchi, Phys. Rev. E 68, 066210 (2003).
- [117] D.H. Zanette e M.A. Montemurro, Phys. Rev. E 67, 031105 (2003); C. Tsallis, Physica D 193, 3 (2004); ver também [111].
- [118] F. Neri, Lie algebras and canonical integration, Department of Physics, University of Maryland, preprint (1988); H. Yoshida, Phys. Lett. A 150, 262 (1990).
- [119] C. Anteneodo, e R.O. Vallejos, Physica A **344**, 383 (2004).

- [120] Y.Y. Yamaguchi, J. Barré, F. Bouchet, T. Dauxois, e S. Ruffo, Physica A 337, 36 (2004).
- [121] Isto tem sido indicado por Yamaguchi em Ref. [116] desde outra perspectiva e com outro tipo de condições iniciais.
- [122] F.A. Tamarit, G. Maglione, D.A. Stariolo, e C. Anteneodo, Phys. Rev. E 71, 036148 (2005).
- [123] C. Tsallis e D.J. Bukman, Phys. Rev. E 54, R2197 (1996); A.R. Plastino e A. Plastino, Physica A 222, 347 (1995); L.A. Peletier em Applications of nonlinear analysis in the physical sciences Pitman, Massachusetts (1981).
- [124] A. Einstein, Annalen der Physik **33**, 1275 (1910) [Usually W is put equal to the number of complexions... In order to calculate W, one needs a complete (molecular-mechanical) theory of the system under consideration. Therefore it is dubious whether the Boltzmann principle has any meaning without a complete molecular-mechanical theory or some other theory which describes the elementary processes. $S = \frac{R}{N} \log W + \text{const.}$ seems without content, from a phenomenological point of view, without giving in addition such an Elementartheorie. (Translation from Abraham Pais, Subtle is the Lord..., Oxford University Press, 1982)].
- [125] K. Huang, Statistical Mechanics (J. Wiley and Sons, New York, 1987), p. 90-91 [We mentioned the ergodic theorem in Section 3.4, but did not use it as a basis for the microcanonical ensemble, even though, on the surface, it seems to be the justification we need. The reason is that existing proofs of the theorem all share (...) an avoidance of dynamics. For this reason, they cannot provide the true relaxation time for a system to reach local equilibrium (typically about 10⁻¹⁵ s for real systems), but have a characteristic time scale of the order of the Poincaré cycle. For this reason, the ergodic theorem has so far been an interesting mathematical exercise irrelevant to physics.].

- [126] F. Takens, em Structures in dynamics Finite dimensional deterministic studies, eds. H.W. Broer, F. Dumortier, S.J. van Strien e F. Takens (North-Holland, Amsterdam, 1991), pagina 253 ["The values of p_i are determined by the following dogma: if the energy of the system in the i^{th} state is E_i and if the temperature of the system is Tthen: $p_i = \exp\{-E_i/kT\}/Z(T)$, where $Z(T) = \sum_i \exp\{-E_i/kT\}$, (this last constant is taken so that $\sum_i p_i = 1$). This choice of p_i is called Gibbs distribution. We shall give no justification for this dogma; even a physicist like Ruelle disposes of this question as deep and incompletely clarified."
- [127] A. Carati, L. Galgani e B. Pozzi, Phys. Rev. Lett. 90, 010601 (2004); M.C. Carotta,
 C. Ferrario, G. Lo Vecchio, e L. Galgani, Phys. Rev. A 17, 786 (1978).
- [128] R. Livi, M. Pettini, S. Ruffo e A. Vulpiani, J. Stat. Phys. 48, 539 (1987); ver também
 D. Escande, H. Kantz, R. Livi e S. Ruffo, J. Stat. Phys. 76, 605 (1994).
- [129] M. Pettini, L. Casetti, M. Cerruti-Sola, R. Franzosi e E. G. D. Cohen, Chaos 15, 015106 (2005)
- [130] E.G.D. Cohen, Physica A 305, 19 (2002); E.G.D. Cohen, Boltzmann and Einstein: Statistics and dynamics - An unsolved problem, Boltzmann Award Lecture, Pramana -Journal of Physics 64, 635 (2005).
- [131] L. Casetti, M. Pettini e E.G.D. Cohen, Phys. Rep. 337, 237 (2000).
- [132] D. Frenkel e B. Smit, Understanding Molecular Simulation Academic Press, San Diego (1996).
- [133] V. Latora, A. Rapisarda e C. Tsallis, Phys. Rev. E 64, 056134 (2001). ver também Ref.([82]);
- [134] de Oliveira, P. M. C., Penna, T. J. P., Herrmann, H. J., Eur. Phys. J. B 1, 205 (1998).

- [135] G. J. Chaitin, Algorithmic Information Theory (University Press, Cambridge, MA) 1990.
- [136] A. N. Kolmogorov, Three approaches to the quantitative definition of information, Probl. Inform. Transm., 1 (1965) 1.
- [137] M. Gell-Mann e C. Tsallis (eds.), Nonextensive Entropy Interdisciplinary Applications (Oxford Univiversity Press, New York) 2004.
- [138] M. Gell-Mann, The Quark and the Jaguar: Adventures in the Simple and the Complex, (W. H. Freeman and Company, New York) 1994.
- [139] R.N. Mantegna e H.E. Stanley, An Introduction to Econophysics: Correlations and Complexity in Finance Cambridge University Press (1999); J.-P. Bouchaud e M. Potters, Theory of Financial Risks: From Statistical Physics to Risk Management Cambridge University Press (2000); J. Voit, The Statistical Mechanics of Financial Markets Springer-Verlag, Berlin (2003).
- [140] C. Tsallis, em News and Expectations in Thermostatistics, editado por G. Kaniadakis e M. Lissia, Physica A 340, 1 (2004);
- [141] R. Osorio, L. Borland e C. Tsallis, p.321 em Ref. [137]
- [142] S.M. Duarte Queirós, Europhys. Lett. **73**, 339 (2005).
- [143] P. Bak, How Nature Works: The Science of Self Organized Criticality (Copernicus, Oxford) 1997; ver Ref. [159].
- [144] B.B. Mandelbrot, Sci. Am. 280, 70 (1999); K. Matia, Y. Ashkenazy e H.E. Stanley, Europhys. Lett. 61, 422 (2003).
- [145] S. Ghashghaie, W. Breymann, J. Peinke, P. Talkner e Y. Dodge, Nature 381, 767 (1996).

- [146] P. Gopikrishnan, V. Plerou, X. Gabaix e H.E. Stanley, Phys. Rev. E 62, R4493 (2000).
- [147] S.M. Duarte Queirós e C. Tsallis, a ser publicado pela Eur. Phys. J. B, (2005). eprint[cond-mat/0501230].
- [148] J. W. Kantelhardt, S. Zschiegner, E. Koscielny-Bunde, A. Bunde, S. Havlin, e H. E. Stanley, Physica A 316, 87 (2002).
- [149] C. Tsallis, Phys. Rev. E 58, 1442 (1998); L. Borland, A.R. Plastino e C. Tsallis, J. Math. Phys. 39, 6490 (1998); Corrigenda: 40, 2196 (1998).
- [150] H. Risken, The Fokker-Planck Equation: Methods of Solution and Applications, 2^{da}
 Ed. Springer-Verlag, Berlin (1989).
- [151] C. Beck e E.G.D. Cohen, Physica A **322**, 267 (2003).
- [152] S.M. Duarte Queirós, C. Tsallis, em andamento.
- [153] W. Feller, Ann. of Math. 54, 173 (1951).
- [154] C. Beck, E.G.D. Cohen e H.L. Swinney, Phys. Rev. E 72, 056133 (2005).
- [155] C. W. Gardiner, Handbook of Stochastic Methods Springer, Berlin, (1985).
- [156] A. Arnéodo, J.-F. Muzy e D. Sornette, Eur. Phys. J. B 2, 277 (1998).
- [157] J.M. Karpoff, J. Finan. Quantitat. Anal. 22, 109 (1997).
- [158] P. Gopikrishnan, V. Plerou, X. Gabaix e H.E. Stanley, Phys. Rev. E 62, R4493 (2000); Ver também Ref. [141].
- [159] J. Feder, *Fractals* (Plenum, New York), 1988.
- [160] A. Admati e P. Pfleiderer, Rev. Financial Studies 1, 3 (1988).
- [161] M.L. Lyra e C. Tsallis, Phys. Rev. Lett. 80, 53 (1998).
BIBLIOGRAFIA

- [162] K. Huang, Statistical Mechanics, John Wiley & Sons, New York (1963).
- [163] M. Gell-Mann e C. Tsallis (eds.), Nonextensive Entropy Interdisciplinary Applications, Oxford University Press, New York, (2004).
- [164] E. Fermi, *Thermodynamics*, Doubleday, New York, (1936).
- [165] N. G. Van Kampen, J. Stat. Phys. 24, 175 (1981).
- [166] A.I. Khinchin, Mathematical Foundations of Information Theory Dover, New York (1957) e Mathematical Foundations of Satistical Mechanics Dover, New York (1960).
- [167] A. Admati e P. Pfleiderer, Rev. Fin. Stud. 1, 3 (1988); Y. Liu, P. Gopikrishnan, P. Cizeau, M. Meyer, C.-K. Peng e H.E. Stanley, Phys. Rev. E 60, 1390 (1999).
- [168] B. Lesche, J. Stat. Phys. 27, 419 (1982)
- [169] Y. Liu, P. Gopikrishnan, P. Cizeau, M. Meyer, C.-K. Peng, e H. E. Stanley, Phys. Rev. E 60, 1390 (1999).
- [170] C. Tsallis, p.13 em [172]; Y. Sato e C. Tsallis, Proceedings of the Summer School and Conference on Complexity, Patras e Olympia (2004), editado por T. Bountis, G. Casati e I. Procaccia, International Journal of Bifurcation and Chaos (2006), *eprint* [cond-mat/0411073]; C. Tsallis, Milan Journal of Mathematics 73, 145 (2005); C. Tsallis, M. Gell-Mann e Y. Sato, Pro. Natl. Acad. Sci. USA 102, 15377 (2005); Ver também Ref. [171]
- [171] C. Tsallis, M. Gell-Mann e Y. Sato, Europhysics News 36, 186 (2005).
- [172] Complexity, Metastability and Nonextensivity, editado por C. Beck, G. Benedek, A. Rapisarda e C. Tsallis, World Scientific, Singapore (2005);
- [173] Nonextensive statistical mechanics: new trends, new perpectives, editado por J.P.Boon e C. Tsallis, Europhys. News 36 (6) (2005).

- [174] L. Bachelier, Théorie de la spéculation, Ann. Sci. École Norm. Sup. III-17, 21 (1900).
- [175] A. Einstein, Ann. der Phys. **17**, 549 (1905).
- [176] L. Borland, Phys. Rev. E 57, 6634 (1998).
- [177] S.M. Duarte Queirós, Quantit. Finance 5, 475 (2005); S.M. Duarte Queirós, working paper CBPF-NF-027/05.
- [178] N. Wiener, J. Math. Phys. 58 131, (1923).
- [179] W. Feller, Ann. of Math. 54, 173 (1951).
- [180] C. J. Tessone e H. S. Wio, Mod. Phys. Lett. B 12, 1195 (1998).
- [181] S. E. Mangioni, R. R. Deza, R. Toral e H. S. Wio, Phys. Rev. E 61, 223 (2000).
- [182] C. F. Moukarzel, J. Phys.: Condens. Matter 14, 2379 (2002).
- [183] C. Anteneodo e C. Tsallis, J. Math. Phys. 44, 5194 (2003).
- [184] C. Anteneodo, comunicação pessoal (2006).
- [185] P. Gopikrishnan, V. Plerou, X. Gabaix e H.E. Stanley, Phys. Rev. E 62, R4493 (2000).
- [186] S.M. Duarte Queirós, Europhys. Lett. **71**, 339 (2005).
- [187] T. Arimitsu e N. Arimitsu, Physica A 305, 218 (2002). P. Jizba e T. Arimitsu, Phys.
 Rev. E 69 026128 (2001).
- [188] http://www.forbes.com
- [189] L.F. Burlaga e A.F.-Viñas, Physica A **356**, 375 (2005).
- [190] B.M. Boghosian e E.P. Borges, comunicação pessoal (2005).
- [191] M.L. Lyra e C. Tsallis, Phys. Rev. Lett. 80, 53 (1997).
- [192] H.E. Stanley, L.A.N. Amaral, P. Gopikrishnan e V. Plerou, Physica A 283, 31 (2000).