

3

Não-extensividade termodinâmica

3.1

Introdução

Este capítulo objetiva abordar, ainda que muito sucintamente, os fundamentos da forma entrópica clássica, atribuída a L. Boltzmann. São descritas as situações em que sua utilização tem sido feita com sucesso, bem como suas limitações.

Analisa-se, também, a entropia proposta por Tsallis, não como uma substituição à de Boltzmann, mas como uma alternativa apropriada a fenômenos físicos que desenvolvem correlações espaço-temporais de longo alcance (i.é., não-localidade espacial e temporal).

Observa-se, igualmente, que esta nova proposição de investigação do intercâmbio de informações no interior de sistemas está relacionada à homotetia de escala espaço-temporal (multifractalidade), sendo, por conseguinte, apta para a descrição de fenômenos que têm como forma de simetria preponderante a auto-semelhança de escala.

Situações em que tem sido aplicada com sucesso, bem como as diferentes metodologias para a determinação do parâmetro entrópico q , também são abordadas.

3.2

Limitações da mecânica estatística e termodinâmica tradicionais

Durante muito tempo pensou-se que a mecânica de Newton tivesse validade ilimitada, podendo ser aplicada a todos os sistemas físicos em quaisquer situações. Entretanto, após o advento da Mecânica Quântica e da Teoria da Relatividade, que lidam com fenômenos nos quais as massas envolvidas são muito pequenas, e as velocidades muito próximas da velocidade da luz, a realidade física mostrou-se bem mais complexa e sutil, colocando a Mecânica Clássica dentro de limites de aplicabilidade bem estabelecidos.

Situação semelhante vem ocorrendo com a mecânica estatística usual e a termodinâmica clássica. A mecânica (ou física) estatística é um ramo da física da matéria condensada que trata das propriedades de sistemas macroscópicos constituídos por uma grande número de elementos. Mais especificamente, ela se propõe a investigar como as propriedades concernentes à micro-escala dos sistemas aparecem na macro-escala, utilizando, para tanto, a estatística na análise de sistemas formados por muitos corpos.

Um papel central no arcabouço teórico da mecânica e da termodinâmica clássicas desempenha o conceito de *entropia*. O esclarecimento de seu significado físico reveste-se, pois, de grande importância. Foi o destacado físico austríaco Ludwig Boltzmann quem propôs, pela primeira vez, uma relação unívoca entre o valor da entropia de uma substância em um dado estado, e a probabilidade termodinâmica deste mesmo estado. De modo a tornar clara a assertiva anterior, analisar-se-á, inicialmente, de forma sucinta, os conceitos de probabilidade matemática e probabilidade termodinâmica.

Probabilidade matemática, como se sabe, é a razão entre o número de casos favoráveis relativamente ao número de casos igualmente possíveis num experimento estatístico. O exemplo a seguir, diretamente relacionado com a termodinâmica, servirá para esclarecer este conceito.

Suponha que, em um recipiente dividido mentalmente em duas partes iguais, exista uma molécula que se encontra em movimento desordenado. Qual será a probabilidade matemática de que, num dado instante, a molécula se encontre em uma das metades (a da esquerda, por exemplo) do recipiente? Como, pelas condições do problema, a parte esquerda do recipiente tem a mesma

capacidade de armazenamento que a da direita, e a molécula de gás pode encontrar-se em qualquer ponto de seu espaço interior, a probabilidade matemática será, naturalmente,

$$W_1 = \frac{1}{2} \quad (3.1)$$

Caso houvesse duas moléculas, a probabilidade de que as mesmas se encontrassem em uma mesma metade do recipiente seria

$$W_2 = \frac{1}{2} \times \frac{1}{2} = \left(\frac{1}{2}\right)^2 \quad (3.2)$$

É evidente que, no caso de haver N moléculas, a probabilidade matemática associada ao caso de tê-las todas situadas em um mesmo lado do recipiente será

$$W_N = \left(\frac{1}{2}\right)^N \quad (3.3)$$

Uma vez que N é um número muito grande (da ordem do número de Avogadro, por exemplo), a probabilidade será muito pequena, tornando, por conseguinte, muito reduzida a possibilidade de que se produza um aumento espontâneo da pressão do gás em uma das metades do recipiente.

Por outro lado, o *segundo princípio da termodinâmica* (Callen [34]) estabelece que transformações que ocorrem espontaneamente são irreversíveis. Portanto, nos processos ditos *irreversíveis* (por exemplo, a difusão de um gás, a condução de calor entre dois corpos a diferentes temperaturas, a expansão de um gás, etc) levados a cabo em sistemas isolados, sua entropia deverá sempre aumentar.

Além disso, a probabilidade matemática de que um processo espontâneo se desenvolva no sentido da diminuição da entropia do sistema isolado é tão pequena que, na prática, tal processo nunca ocorrerá espontaneamente.

No entanto, cabe observar que, em sistemas ditos abertos, a entropia pode diminuir em alguma região, graças a algum processo organizativo que esteja tendo

lugar. Porém, esta diminuição deverá ser acompanhada, necessariamente, de um aumento da entropia em alguma outra parte do sistema.

Assim, pode-se concluir que a entropia e a probabilidade matemática estejam, de alguma forma, relacionadas.

Um outro conceito importante é o que diz respeito aos estados macroscópico e microscópico de um sistema. O *estado macroscópico* é aquele determinado por parâmetros termodinâmicos – pressão, temperatura, energia interna, etc –, sendo que, para uma substância pura, ele é completamente descrito por dois parâmetros quaisquer do sistema.

O *estado microscópico* é aquele determinado pelo conjunto dos parâmetros que definem o estado de cada uma das moléculas constituintes do sistema – posição, velocidade, etc. Portanto, na definição unívoca de um estado microscópico, deverão estar em jogo os parâmetros definidores de *todas* as moléculas formadoras do sistema em estudo.

É lícito supor que um mesmo estado macroscópico corresponda a um grande número de estados microscópicos diferentes. Ademais, a invariabilidade do estado macroscópico não pode condicionar a do microscópico. Naturalmente, não se deve inferir que, face à contínua evolução dos estados microscópicos de um dado sistema, deva-se produzir, necessariamente, uma alteração no seu estado macroscópico. Geralmente, um dado estado macroscópico possui uma grande quantidade de estados microscópicos que o realizam. Para um observador exterior, ao qual só é permitido o acesso à variação dos parâmetros termodinâmicos, tudo se passa como se o macro-sistema permanecesse invariável.

A *probabilidade termodinâmica* de um estado macroscópico é o número de estados microscópicos que realizam aquele estado macroscópico. Diferentemente da probabilidade matemática, que pode adquirir valores fracionários (próprios), a probabilidade termodinâmica se expressa por meio de um número inteiro, normalmente muito grande.

Se, em um dado sistema isolado, graças a um processo espontâneo, ocorre uma alteração do estado macroscópico do sistema, então, o novo estado macroscópico possuirá uma quantidade maior de estados microscópicos que o realizam que o anterior. Por conseguinte, como resultado do processo espontâneo descrito anteriormente, a probabilidade termodinâmica do referido sistema tende a

aumentar, razão pela qual, na natureza, segundo Boltzmann, os processos tendem a passar dos estados menos prováveis aos mais prováveis.

O aumento da entropia de um sistema isolado, em transformações irreversíveis, por um lado, e o correspondente aumento de sua probabilidade termodinâmica, por outro, faz supor que esta e aquela estejam relacionadas de alguma forma, ou seja, que $S = \varphi(W)$.

No intuito de determinar esta relação funcional, imaginar-se-á, à continuação, dois sistemas, de entropias S_1 e S_2 , com probabilidades termodinâmicas W_1 e W_2 . Admitir-se-á, ainda, que estes dois sistemas integram um sistema total de entropia S e probabilidade termodinâmica W . Em razão da propriedade de *aditividade* da entropia, pode-se escrever

$$S = S_1 + S_2 \quad (3.4)$$

com a correspondente probabilidade termodinâmica do sistema total dada por

$$W = W_1 W_2 \quad (3.5)$$

já que, cada um dos estados microscópicos do sistema 1, tomado em conjunto com qualquer dos estados microscópicos do sistema 2, fornece o estado microscópico do sistema total (i.é., ambos os sistemas são estatisticamente independentes).

Como a entropia de cada sistema está vinculada à sua probabilidade termodinâmica segundo uma mesma dependência funcional, então

$$S_1 = \varphi(W_1) \quad (3.6)$$

$$S_2 = \varphi(W_2) \quad (3.7)$$

e

$$S = \varphi(W) \quad (3.8)$$

Pode-se, então, escrever a seguinte equação

$$\varphi(W_1 W_2) = \varphi(W_1) + \varphi(W_2) \quad (3.9)$$

Derivando a relação (3.9) em relação a W_1 , vem

$$W_2 \frac{d}{d(W_1 W_2)} \frac{d(W_1 W_2)}{dW_2} \left(\frac{d\varphi}{d(W_1 W_2)} \right) + \frac{d\varphi}{d(W_1 W_2)} = 0 \quad (3.10)$$

Procedendo analogamente em relação a W_2 , tem-se que

$$W_1 W_2 \frac{d}{d(W_1 W_2)} \left(\frac{d\varphi}{d(W_1 W_2)} \right) + \frac{d\varphi}{d(W_1 W_2)} = 0 \quad (3.11)$$

ou

$$W_1 W_2 \left(\frac{d^2 \varphi}{d(W_1 W_2)^2} \right) + \frac{d\varphi}{d(W_1 W_2)} = 0 \quad (3.12)$$

Levando-se (3.5) em (3.12), vem que

$$\left(\frac{d^2 \varphi}{d(W)^2} \right) W + \frac{d\varphi}{dW} = 0 \quad (3.13)$$

A expressão (3.13) é uma equação diferencial de segunda ordem que, uma vez resolvida, fornece a relação procurada entre a entropia de um sistema físico e sua probabilidade termodinâmica, ou seja,

$$S = \kappa_B \ln W \quad (3.14)$$

em que κ_B é a constante de Boltzmann.

No entanto, (3.14) é uma expressão particular de uma caso mais geral, no qual a probabilidade termodinâmica do sistema não é igual para todos os microestados que realizam aquele dado estado macroscópico. Assim, a expressão acima se transforma na chamada entropia de Boltzmann-Gibbs (Callen [34]),

$$S_1 = -\kappa_B \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i \quad (3.15)$$

onde p_i é a probabilidade do sistema encontrar-se no seu i -ésimo estado ($\sum_i p_i = 1$), e o somatório é efetuado sobre todos os micro-estados possíveis W em que o sistema pode ser encontrado (o significado do subscrito 1 será esclarecido mais adiante). Para o caso especial em que todos os estados microscópicos têm igual probabilidade de serem realizados macroscopicamente - ou seja, $p_i = 1/W$, independentemente de i -, a expressão (3.15) transformar-se-á na (3.14).

Observe-se que, na dedução da relação (3.14), fez-se uso da propriedade da *aditividade* (também chamada de *extensividade*), fato este retratado na própria forma entrópica *logarítmica* (3.15). Assim, a entropia de um sistema composto é igual à soma das entropias dos subsistemas A e B formadores do sistema original,

$$S_1(A + B) = S_1(A) + S_1(B) \quad (3.16)$$

A mecânica estatística, baseada na entropia (3.15), tem encontrado sua correta aplicação em sistemas físicos que guardam as seguintes características:

- Sistemas absolutamente *sem* interação ou com interações espaciais de *curto* alcance entre seus elementos constituintes;
- Sistemas com memória temporal de *curto* alcance (sistemas ditos *markovianos*), e
- Sistemas cuja evolução no espaço de fase *não* é (multi)fractal.

Entretanto, pesquisas recentes [35] têm sugerido que determinados sistemas físicos possam apresentar comportamento totalmente anômalo e discordante com o estabelecido por (3.15). Em especial, parece não haver nenhuma razão para que a entropia seja sempre uma propriedade extensiva.

Assim, os próprios fundamentos da mecânica estatística e termodinâmica usuais, baseados na aludida forma entrópica *logarítmica*, estariam sob suspeição. Este fato tem sido, de longa data, reconhecido por diferentes autores.

P. Landsberg [36], por exemplo, escreve: “*A systematic development is given of the view that, in the case of systems with **long-range forces** and which*

are, therefore, **nonextensive** (in some sense), some thermodynamic results do not hold. Among these is the relation $U - TS + pV = \mu N$ and the Gibbs-Duhem equation. If a search for an equilibrium state is made by maximization of the entropy, one may obtain misleading results (...) The circumstance that the main variables of thermodynamics in the **absence of long-range forces** are intensive or extensive can not be deduced from the so-called “laws” of thermodynamics. Nonetheless, it is a **very important characteristic of “normal” thermodynamic systems**, and that is why it was recognized as such long ago, before the advent of black holes (...) In any case, **any treatment of “normal” thermodynamics should rule out long-range forces** early on in the discussion. Anyone who wants to check carefully which parts of thermodynamics may, or may not, be used when long-range forces play a part will find **little** in the archival literature”.

Portanto, a razão pela qual a formulação clássica não funciona a contento parece residir na presença de *efeitos não-locais*, despertados pelas interações de longo alcance desenvolvidas no interior do sistema em evolução.

Um exemplo bastante útil e instrutivo das limitações envolvendo a formulação tradicional da mecânica estatística, calcada, como já se observou, na expressão (3.15), é dado pela tentativa de obtenção da *difusão anômala*, a partir de uma metodologia que leva em conta a maximização de (3.15). Como se sabe, o caráter anômalo é conferido ao processo difusivo, em contraposição à *difusão normal*, pela possibilidade de uma dada partícula dar saltos [37]. A análise apresentada adiante foi levada a cabo por E.W. Montroll e M.F. Shlesinger [38].

3.3

Formalismo tradicional aplicado à difusão anômala unidimensional

De forma a incluir a difusão normal (*movimento Browniano*) no arcabouço da mecânica estatística clássica (i.é., do *equilíbrio*), um procedimento muito elegante, baseado na *máxima entropia* [39], foi aplicado, de modo a se obter a distribuição de probabilidade dos passos $p(x)$ de uma partícula difundindo ao longo do eixo x .

Portanto, trata-se, como já se observou, de *maximizar* a entropia

$$S_1 = -\kappa_B \int p(x) \ln p(x) dx \quad (3.17)$$

submetida às seguintes restrições:

$$\bullet \int p(x) dx = 1 \quad (3.18)$$

$$\bullet \langle x^2 \rangle = \int x^2 p(x) dx = \sigma^2 \quad (3.19)$$

onde a primeira restrição é uma condição de normalização sobre as probabilidades, e a segunda, é a própria definição de variância (*finita*, neste caso).

Note-se, também, que a expressão (3.17) nada mais é do que a (3.15) colocada sob a forma contínua, onde $p(x)$ é a probabilidade da partícula efetuar um salto de tamanho x .

Isto posto, pode-se mostrar que a distribuição probabilística para um único passo, que otimiza a entropia de Boltzmann-Gibbs (3.15) é dada por

$$p_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \quad (3.20)$$

ou seja, é uma distribuição gaussiana.

Para N passos, a distribuição resultante, devido ao teorema do limite central [40], tem forma semelhante a (3.20) (i.é., a distribuição gaussiana é atratora no espaço de probabilidades). Portanto,

$$p_1(x, N) = \frac{1}{\sqrt{2\pi N\sigma^2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2N\sigma^2}\right) \quad (3.21)$$

Uma vez que a variância (3.19) associada à probabilidade $p(x)$ é finita, a partícula descreve uma *difusão normal*.

A questão colocada em [38] foi a de como incluir a possibilidade de difusão anômala (i.é., como se obter distribuições probabilísticas para os passos da partícula difusiva caracterizadas por *caudas longas*, permitindo saltos ou vôos de Lévy) nos marcos da formulação tradicional da entropia logarítmica de Boltzmann-Gibbs.

Montroll e Shlesinger mostraram que tal objetivo poderia ser alcançado, caso se maximizasse (3.15), submetida à restrição (3.18), sendo, porém, (3.19) substituída por

$$\left\langle \ln \left[\left(\frac{1}{2\pi} \right) \int \exp(-i\kappa x - b|\kappa|^\gamma) d\kappa \right] \right\rangle \geq \text{constante} \quad (3.22)$$

em que $b > 0$.

Face à complexidade e ao caráter marcadamente antinatural, a resposta (3.22) é extremamente insatisfatória para ser adotada como uma condição restritiva fornecida *a priori*. De acordo com os próprios autores “(...) *the derivation of the distributions with inverse power tails from a maximum entropy formalism would be a consequence only of an **unconventional** auxiliary condition that involves the specification of the average value of a **complicated** logarithmic function (...) Hence, the wonderful world of clusters and intermittencies and bursts that is associated with Lévy distributions would be hidden from us if we depended on a maximum entropy formalism that employed simple and traditional auxiliary conditions*”.

Uma abordagem diferente foi proposta por Constantino Tsallis, do Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF). Já que a substituição da restrição (3.19) pela (3.22) fornece uma condição totalmente artificial, uma possível solução para este problema seria substituir a própria forma entrópica (3.17).

Tsallis *et al.* [41] mostraram que, efetivamente, a substituição de (3.15) por uma nova entropia, desta feita submetida às restrições dadas por esta nova teoria,

fornece distribuições probabilísticas de cauda longa para o salto da partícula, ou seja, em forma de *leis de potência*, características dos processos difusivos não-locais.

Ademais, esta nova proposição generaliza a entropia clássica de Boltzmann-Gibbs, colocando, desta forma, as distribuições probabilísticas em leis de potência (das quais a de Lévy é um caso particular) em um mesmo nível teórico que as exponenciais (gaussianas).

3.4

Breve exposição da não-extensividade entrópica

No item anterior assinalou-se que há vários sistemas físicos nos quais a mecânica estatística tradicional de Boltzmann-Gibbs e a termodinâmica clássica não podem ser satisfatoriamente aplicadas. Mais especificamente, sistemas caracterizados por:

- Interações (forças) de *longo* alcance entre seus elementos constituintes, *e/ou*
- Memória temporal igualmente de *longo* alcance, *e/ou*
- Evolução no espaço de fase é *(multi)fractal*, *e/ou*
- Existe algum tipo de *dissipação*,

são os que normalmente apresentam dificuldades (integrais divergentes, etc) no cálculo de grandezas termoestatísticas.

É curioso observar que efeitos relacionados à *não-localidade* das interações também acarretam dificuldades em abordagens determinísticas da física do contínuo (Cemal Eringen [42,43]).

Como se pode observar, as características supracitadas são frontalmente diferentes daquelas que servem de fundamento à mecânica estatística clássica. Sistemas que compartilham destas últimas características são ditos *não-extensivos*, ou seja, requerem uma forma entrópica diferenciada, que contemple a possibilidade de tratar interações de longo alcance. No bojo desta nova proposição deverá estar a possibilidade de que a entropia de um sistema composto possa ser maior ou menor que a correspondente à soma das entropias de suas partes

constituintes, fato, aliás, em franca discrepância com o estabelecido no item (3.2) e incorporado nas expressões (3.15) e (3.16).

Tsallis propôs em 1988 [44] uma nova forma entrópica, mais geral que (3.15), a saber:

$$S_q = \kappa \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i^q}{q-1} \quad (3.23)$$

com $\sum p_i = 1$, onde κ é uma constante positiva, q é um parâmetro adimensional ($-\infty < q \leq 3$, $q \in \mathbb{R}$), e a soma, tal como anteriormente, é tomada sobre todos os estados microscópicos W acessíveis ao sistema.

A expressão (3.23) recupera – utilizando $p_i^{q-1} \cong 1 + (q-1) \ln p_i$ – a entropia (3.15) de Boltzmann-Gibbs no limite $q \rightarrow 1$. Pode, também, privilegiar a ocorrência de eventos raros (i.é., localizados justamente nas caudas das distribuições estatísticas), já que a probabilidade p_i está elevada a uma dada potência, resultando, por conseguinte, em um número bastante significativo.

O índice entrópico q caracteriza o grau de *não-extensividade* (*não-aditividade*, ou ainda *não-localidade*) do sistema, e está intimamente relacionado à sua dinâmica microscópica.

Além disso, Tsallis *et al.* [45], Curado e Tsallis [46] e Tsallis *et al.* [47] mostraram que, para dois sistemas estatisticamente independentes A e B, rege a seguinte *regra de composição pseudo-aditiva* para S_q :

$$\frac{S_q(A+B)}{\kappa} = \frac{S_q(A)}{\kappa} + \frac{S_q(B)}{\kappa} + (1-q) \frac{S_q(A)}{\kappa} \frac{S_q(B)}{\kappa} \quad (3.24)$$

Observa-se que $q < 1$, $q = 1$ e $q > 1$ correspondem, respectivamente, à entropia *superaditiva* (*superextensiva*), *aditiva* (*extensiva*) e *subaditiva* (*subextensiva*).

Uma propriedade notável desta nova proposição *não-logarítmica* é a seguinte: a entropia de Boltzmann-Gibbs S_I (i.é., S_q com $q \rightarrow 1$) satisfaz à seguinte relação

$$-\kappa \left[\frac{d(\sum p_i^\alpha)}{d\alpha} \right]_{\alpha=1} = -\kappa \sum p_i \ln p_i \equiv S_1 \quad (3.25)$$

Além disso, Jackson [48,49] introduziu o seguinte *operador diferencial generalizado* (aplicado a uma função arbitrária $f(x)$)

$$D_q f(x) \equiv \frac{f(qx) - f(x)}{qx - x} \quad (3.26)$$

que satisfaz $D_1 \equiv \lim_{q \rightarrow 1} D_q = d/dx$. Recentemente, Abe [50] mostrou que

$$-\kappa [D_q \sum p_i^\alpha]_{\alpha=1} = \kappa \frac{1 - \sum p_i^q}{q - 1} \equiv S_q \quad (3.27)$$

que auxilia na compreensão da natureza de S_q .

Efetivamente, de acordo com [51], a entropia generalizada (3.23) está baseada na noção de *multifractais* (i.é., fractais heterogêneos) e, portanto, é apropriada para o estudo de sistemas que exibem *invariância de escala*. Por conseguinte, o operador diferencial generalizado de Jackson (3.26) testa a função $f(x)$ sob *dilatação*, ao passo que o operador diferencial ordinário o faz sob *translação*.

Ademais, sistemas que, durante sua evolução, preservam a invariância translacional espaço-temporal são apropriadamente descritos pela termodinâmica usual e a estatística de Boltzmann-Gibbs. Por outro lado, aqueles que têm sua simetria translacional quebrada, devem ser analisados tendo por base a termodinâmica derivada da entropia generalizada de Tsallis.

Cabe ressaltar que a expressão (3.23) preserva muito da estrutura formal relacionada à termodinâmica clássica (p/ex., transformações de Legendre [46,47], estabilidade termodinâmica [52,53], entre outras [51]).

A nova proposição de Tsallis tem sido aplicada com sucesso a uma grande variedade de fenômenos, tais como:

- Sistemas astrofísicos auto-gravitantes [54,55,56];
- Problema dos neutrinos solares [57,58];
- Difusão anômala dos tipos Lévy [41,45,59] e correlacionada [60,61,62];
- Turbulência e equação de Navier-Stokes [63,64,65];
- Teoria das probabilidades [66,67];
- Sistemas dinâmicos dissipativos não-lineares de baixa dimensionalidade, que evoluem na fronteira do caos [68,69,70];
- Sistemas dinâmicos dissipativos não-lineares de alta dimensionalidade (auto-organizados criticamente) [71,72];
- Sistemas dinâmicos conservativos (hamiltonianos) [73]

O leitor interessado em informações adicionais deverá consultar [35] para uma lista completa de assuntos e trabalhos nesta área.

3.5

Quantificação da não-extensividade

O cálculo do índice entrópico q é um passo importante para a compreensão dos fenômenos responsáveis pelo afastamento de determinados sistemas físicos da mecânica estatística e da termodinâmica usuais.

No entanto, julga-se apropriado, antes de se apresentar as metodologias de uso corrente para a avaliação do aludido parâmetro, introduzir algumas noções preliminares utilizando-se do conhecido *mapa (tipo) logístico unidimensional*

$$x_{t+1} = 1 - ax_t^2 \quad , \quad (t = 0, 1, 2, \dots) \quad (3.28)$$

e $(-1 \leq x_t \leq 1)$.

É bem conhecido [74,75] que, para $a < a_c$ (onde a_c é um *valor crítico* igual a 1.4011...), uma evolução regular (*atratores de ciclo finito*) do processo iterativo pode ser observada, ao passo que, no caso em que $a > a_c$, *atratores finitos e infinitos (caos)* estarão presentes. Ademais, à medida em que a se aproxima inferiormente do valor crítico, (3.28) responde com a conhecida *rota para o caos via duplicação de período*, com bifurcações sucessivas [74,75].

A figura 3.1 apresenta o gráfico a vs x_{t+1} ilustrativo da famosa *cascata de duplicação de período de Feigenbaum*.

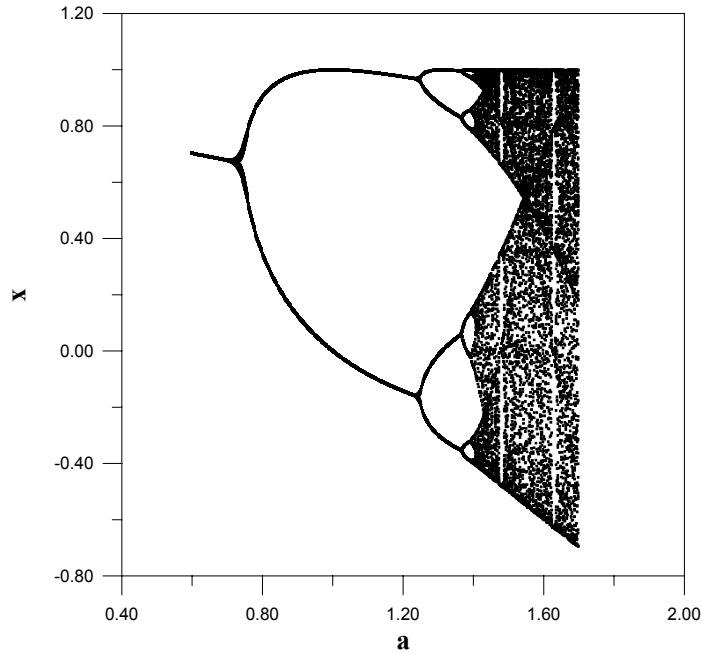


Figura 3.1 - Cascata de bifurcação de Feigenbaum.

Conforme já observado, para valores de a *subcríticos*, o sistema apresenta atratores periódicos e finitos, ao passo que, para a *super-críticos*, os atratores são ditos *estranhos* (*caóticos*). Note-se, também, que, inseridas na zona caótica, estão as chamadas *janelas de periodicidade*, que possuem atratores periódicos.

Suponha-se que $\Delta x(0)$ seja uma pequena variação na condição inicial x_0 de duas trajetórias próximas, e $\Delta x(t)$ sua evolução temporal. Então, pode-se definir a seguinte *função de sensibilidade às condições iniciais* [76]

$$\xi(t) = \lim_{\Delta x(0) \rightarrow 0} \left(\frac{\Delta x(t)}{\Delta x(0)} \right) \quad (3.29)$$

Nos casos em que o sistema apresenta sensibilidade *exponencial*, tem-se que

$$\xi(t) = \exp(\lambda_1 t) \quad (3.30)$$

onde λ_1 é o *expoente de Lyapunov* (a razão do subscrito 1 se tornará clara mais adiante) e t é o tempo. Para as situações em que $\lambda_1 < 0$ e $\lambda_1 > 0$ (figuras 3.2 e 3.3,

respectivamente), diz-se que o sistema é, respectivamente, *fracamente sensível* e *fortemente sensível* às condições iniciais.

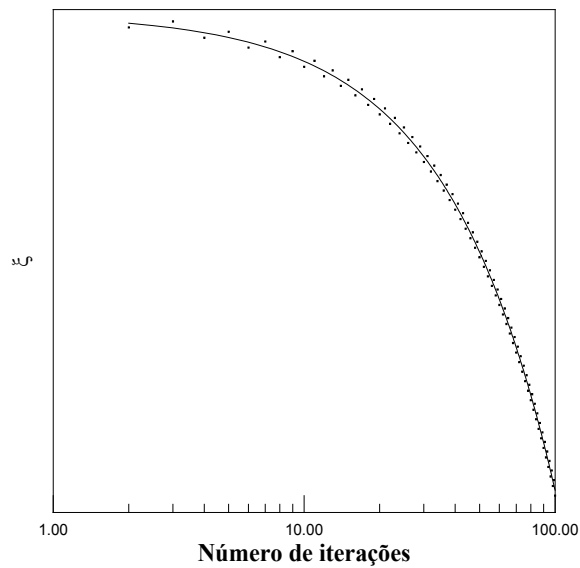


Figura 3.2 – Evolução temporal da função de sensibilidade, para o expoente de Lyapunov inferior a zero. A curva cheia representa uma convergência exponencial (gráfico log-log).

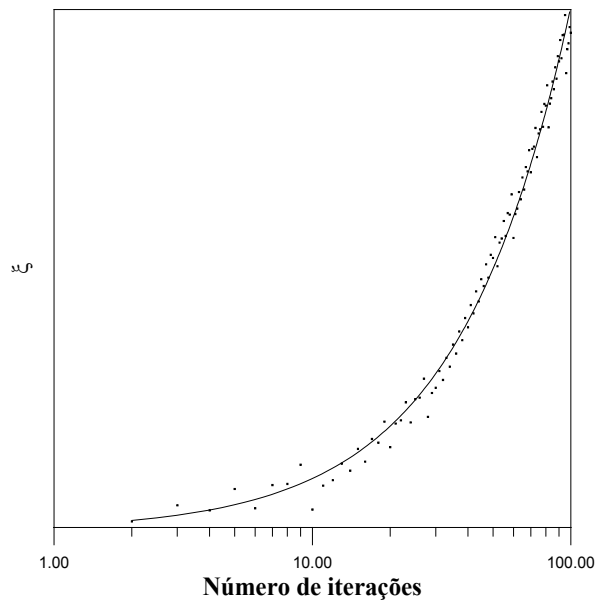


Figura 3.3 – Evolução temporal da função de sensibilidade, para o expoente de Lyapunov superior a zero. A curva cheia representa uma divergência exponencial (gráfico log-log).

Entretanto, no *limiar do caos* (*onset of chaos*) (i.é., para $a = a_c$), $\lambda_1 \rightarrow 0$ e, segundo (3.30), a referida sensibilidade exponencial não mais se aplica, sendo substituída pela sensibilidade em *lei de potência*. Assim,

$$\xi(t) \sim Ct^\delta \quad (3.31)$$

em que C é uma constante. Para $\delta < 0$ ($\delta > 0$), o sistema é referido com *fracamente insensível* (*fracamente sensível*) às condições iniciais.

A figura 3.4 apresenta a variação do expoente de Lyapunov com o valor do parâmetro de controle a , podendo-se observar regiões em que λ_1 possui valores positivos e negativos. Ressalte-se que, em repetidas ocasiões, o gráfico intercepta o eixo horizontal de ordenada nula, indicando sensibilidade potencial às condições iniciais. No entanto, o referido valor crítico de a refere-se especialmente à situação em que λ_1 se anula na entrada do caos.

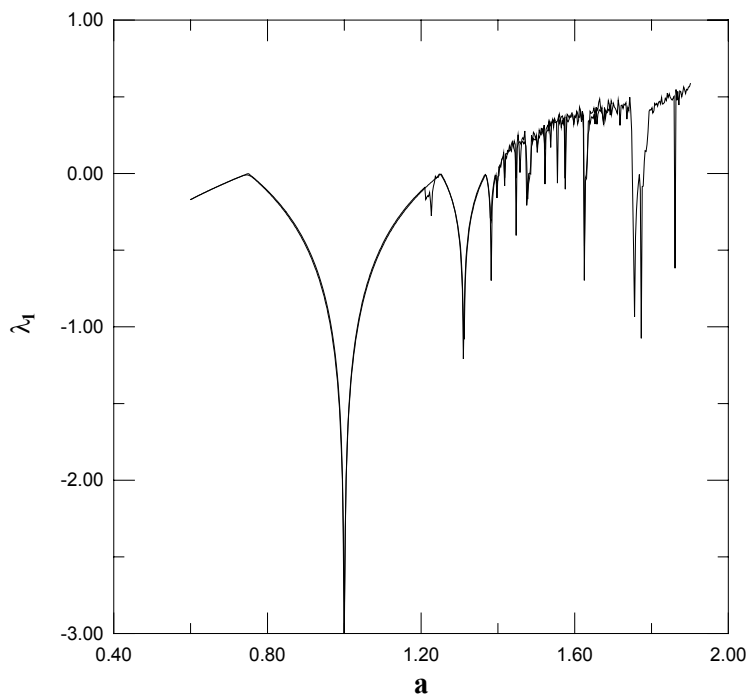


Figura 3.4 – Variação do expoente de Lyapunov com o parâmetro de controle, para o mapa logístico.

A figura 3.5 mostra como a função de sensibilidade varia com o número de iterações do mapa logístico, para o caso de entrada do caos (i.é., $a = a_c$). Observa-

se que, neste valor crítico, rege a sensibilidade em lei de potência, e a própria figura é um *fractal*.

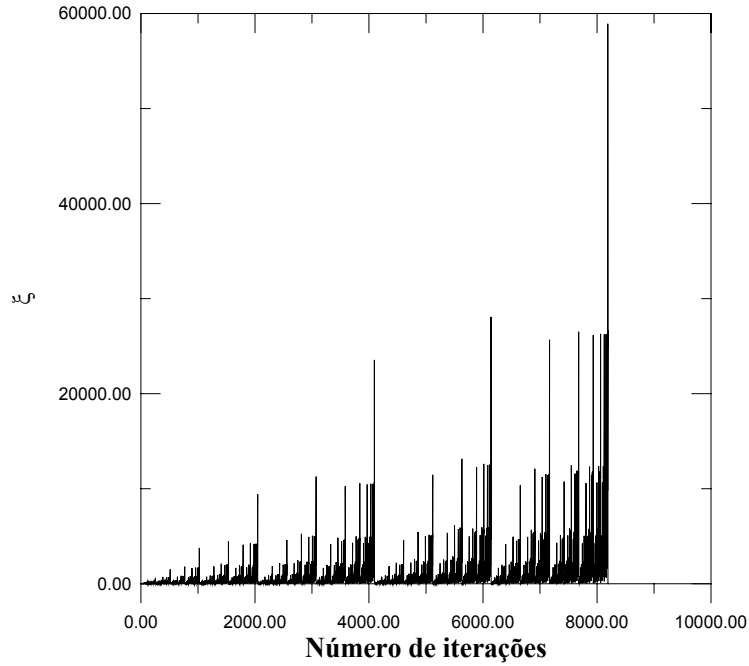


Figura 3.5 - Evolução temporal da função de sensibilidade, para o valor de a crítico. Notar o aspecto fractal da curva, que apresenta uma divergência em lei de potência.

No âmbito da mecânica estatística generalizada, ambas as divergências – exponencial e potencial – podem ser reunidas em uma única expressão matemática, a saber:

$$\xi_q(t) = [1 + (1-q)\lambda_q t]^{\frac{1}{1-q}} \quad (3.32)$$

onde λ_q é o expoente de Lyapunov generalizado.

Ressalte-se que, enquanto (3.30) é solução da equação

$$\frac{d\xi}{dt} = \lambda_1 \xi, \quad (3.33)$$

a solução de (3.32) é

$$\frac{d\xi_q}{dt} = \lambda_q \xi_q^q. \quad (3.34)$$

Por conseguinte, (3.32) recupera (3.30) no limite em que $q \rightarrow 1$, enquanto possibilita o estudo dos casos em que $q \neq 1$, quando vigora a sensibilidade às condições iniciais em lei de potência.

De (3.31) e (3.32) vem que

$$\delta = \frac{1}{1-q} \quad (3.35)$$

A razão pela qual a expressão (3.30) mostra-se insuficiente para distinguir a sensibilidade às condições iniciais de um sistema na entrada do caos parece estar relacionada ao caráter *multifractal não-extensivo* de seu atrator dinâmico [69]. É, pois, viável utilizar, neste caso, as propriedades de escala das regiões *mais rarefeitas* ($\alpha_{\max}$) e *mais concentradas* ($\alpha_{\min}$) do referido atrator multifractal, de modo a se estimar a divergência em lei de potência das órbitas no espaço de fase.

Para tanto [69], imagine-se um conjunto de pontos de um atrator gerados após um tempo suficientemente grande B. Caso se sobreponha à figura do atrator uma malha de diferentes dimensões, a medida (probabilidade) contida em cada caixa constituinte da malha é, portanto, $p_i = 1/B$. Atribuindo a $l_{+\infty}$ e $l_{-\infty}$ o tamanho típico das caixas nas regiões mais concentradas e mais rarefeitas do atrator, os pontos extremos do *espectro multifractal* podem ser determinados por $\alpha_{\min} = \ln p_i / \ln l_{+\infty}$ e $\alpha_{\max} = \ln p_i / \ln l_{-\infty}$ (portanto, $l_{+\infty} \propto B^{-1/\alpha_{\min}}$ e $l_{-\infty} \propto B^{-1/\alpha_{\max}}$, respectivamente).

Ademais, a *menor* separação entre duas trajetórias nas condições iniciais – da ordem, claro está, de $l_{+\infty}$ – pode espalhar-se por uma região do espaço de fase de tamanho máximo da ordem de $l_{-\infty}$, i.é., do tamanho típico da caixa em sua região mais rarefeita.

Então, (3.29) pode ser reescrita, para passos de tempo B suficientemente grandes, como $l_{-\infty} / l_{+\infty} \propto B^{1/(1-q)}$, o que precisamente fornece a relação entre o índice entrópico q e os pontos extremos do espectro de singularidades:

$$\frac{1}{1-q} = \frac{1}{\alpha_{\min}} - \frac{1}{\alpha_{\max}} \quad (3.36)$$

Esta notável expressão relaciona a dinâmica do sistema (membro esquerdo) e a geometria do atrator deste próprio sistema (membro direito). Assim, para cada tipo de atrator que um dado sistema dinâmico apresente, sua geometria no espaço de fase será distinta, acarretando modificações na mecânica e na termodinâmica a serem utilizadas em seu estudo.

Portanto, uma vez conhecidas as propriedades de escala do atrator, é possível inferir de suas propriedades não-extensivas, por intermédio do parâmetro entrópico q .

Para o caso do mapa logístico (3.28), o valor estimado de q é 0.2445...[69].

Retomando, agora, a discussão sobre o índice entrópico q , a literatura especializada [77,78,79] aponta 4 (quatro) métodos para a sua determinação, 2 (dois) dos quais fornecidos pelas expressões (3.29) e (3.36). Não sendo este o momento adequado para o seu detalhamento (com esta finalidade, o leitor interessado poderá consultar [80,81]), este trabalho se restringirá, nos capítulos seguintes, à aplicação das metodologias propostas por estas duas expressões.

Assim, 2 (dois) procedimentos para a determinação do índice entrópico de Tsallis (doravante referidos por (A) e (B)) serão utilizados nesta pesquisa:

(A) O primeiro, tendo por base a noção de *mixing* (i.é., sensibilidade de um dado sistema às condições iniciais), é avaliado pela função de sensibilidade (3.29);

(B) O segundo, enfatizando as características geométricas do atrator do sistema no limiar do caos, e dado pela expressão (3.36).

A equivalência entre ambas as metodologias, assegurada pelas expressões (3.35) e (3.36), tem sido verificada em mapas unidimensionais (especificamente, logísticos e circulares generalizados) na entrada do caos [68,69,70,76]. No entanto, para sistemas dinâmicos constituídos por muitos corpos interagentes, e que são espontaneamente conduzidos ao estado crítico auto-organizado, unicamente a metodologia A tem sido utilizada [71,72].

Determinou-se nesta pesquisa, pela primeira vez, e com a utilização da metodologia A, o parâmetro entrópico q para o sistema dinâmico elasto-plástico, tal como descrito no capítulo 5.

O leitor verá, no momento oportuno, que este sistema, representativo do comportamento de materiais geológicos quando submetidos a carregamentos

externos, comporta-se, efetivamente, como não-aditivo. Em particular, ao longo de sua evolução temporal, desenvolve correlações espaciais e temporais de longo alcance, razão pela qual apresenta, necessariamente, $q \neq 1$.

Além disso, em situações próximas à ruptura, desenvolve comportamentos muito peculiares, que podem ser satisfatoriamente explicados pela chamada *invariância discreta de escala*, objeto de estudo do próximo capítulo.