



LUCAS PEREIRA GOMES DE FIGUEIREDO

**O PRINCÍPIO DA MÍNIMA AÇÃO ESTOCÁSTICO:
UM ESTUDO NO CONTEXTO DOS MOVIMENTOS
RANDÔMICOS E SUA APLICAÇÃO EM EVENTOS TIPO CISNE
NEGRO**

LAVRAS – MG

2021

LUCAS PEREIRA GOMES DE FIGUEIREDO

**O PRINCÍPIO DA MÍNIMA AÇÃO ESTOCÁSTICO:
UM ESTUDO NO CONTEXTO DOS MOVIMENTOS RANDÔMICOS E SUA
APLICAÇÃO EM EVENTOS TIPO CISNE NEGRO**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, área de concentração em Física Estatística, para a obtenção do título de mestre.

Prof. DSc. Rodrigo Santos Bufalo

Orientador

Prof^ª. DSc^a. Tatiana Cardoso e Bufalo

Coorientadora

LAVRAS – MG

2021

**Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema de Geração de Ficha Catalográfica da Biblioteca
Universitária da UFLA, com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).**

Figueiredo, Lucas Pereira Gomes de.

O princípio da mínima ação estocástico : um estudo no
contexto dos movimentos randômicos e sua aplicação em eventos
tipo cisne negro / Lucas Pereira Gomes de Figueiredo. - 2021.
106 p. : il.

Orientador(a): Rodrigo Santos Bufalo.

Coorientador(a): Tatiana Cardoso e Bufalo.

Dissertação (mestrado acadêmico) - Universidade Federal de
Lavras, 2021.

Bibliografia.

1. Cisne negro. 2. Entropia de Tsallis. 3. Processos estocásticos.
I. Bufalo, Rodrigo Santos. II. Bufalo, Tatiana Cardoso e. III. Título.

LUCAS PEREIRA GOMES DE FIGUEIREDO

O PRINCÍPIO DA MÍNIMA AÇÃO ESTOCÁSTICO: UM ESTUDO NO CONTEXTO DOS MOVIMENTOS RANDÔMICOS E SUA APLICAÇÃO EM EVENTOS TIPO CISNE NEGRO

THE STOCHASTIC LEAST ACTION PRINCIPLE: A STUDY ON THE CONTEXT OF THE RANDOM MOVEMENT AND ITS APPLICATION ON BLACK SWAN EVENTS

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, área de concentração em Física Estatística, para a obtenção do título de mestre.

APROVADA em 29 de outubro de 2021.

Prof. DSc. Fábio Lucio Alves	NJU
Prof. DSc. Lucas Nicolao	UFSC
Prof. DSc. Robson André Armino	UFLA



Prof. DSc. Rodrigo Santos Bufalo
Orientador

Prof^a. DSc^a. Tatiana Cardoso e Bufalo
Co-Orientadora

**LAVRAS – MG
2021**

*Este trabalho é dedicado a todos aqueles que, em tempos obscuros, fazem, divulgam e confiam
nas ciências.*

AGRADECIMENTOS

Os resultados apresentados nesta dissertação são frutos de uma longa jornada com momentos de grande alegria e realização, bem como por momentos difíceis e desafiadores; e como qualquer boa jornada, ela não teria sido possível de se realizar sozinho. Por essa razão agradeço imensamente à todos que estiveram comigo neste percurso.

Agradeço à Deus, aquele que, pelos passos de Santo Inácio de Loyola, dia a dia me ensina a viver as consolações e desolações do caminho sempre buscando ser mais.

Agradeço aos meus pais, Cida e Lázaro, e às minhas irmãs, Ana, Betânia e Ester, que me deram suporte material e emocional para chegar até aqui. Bem como ao meu companheiro de vida Iago que está sempre presente.

Agradeço aos meus orientadores, Dr. Rodrigo Santos Bufalo e Dr^a. Tatiana Cardoso e Bufalo, por me guiarem por esta pesquisa e estarem sempre me animando e admoestando ao longo do percurso. Também a todos os professores que fizeram parte da minha trajetória pessoal, em especial ao professor Dr. Luiz Cleber Tavares de Brito com quem dei meus primeiros passos na física.

Agradeço aos colaboradores que auxiliaram na elaboração das simulações e interpretações dos resultados, Dr. Fábio Lúcio Alves e Dr. Qiuping Alexandre Wang. Também ao professor Dr. Igor Saulo Santos de Oliveira no auxílio ao utilizar o *cluster* computacional.

Agradeço aos amigos, sejam eles pessoais ou relacionados a física, que ajudaram a dar graça e força no caminho. Em especial à Helena Rabelo Freitas e Lucas Biasi Gastaldon, amigos da pós-graduação; Pedro Henrique Souza e Rafael Mancini Santos, que muito me ajudaram no desenvolvimento deste trabalho; e aos demais amigos que me ouviram festejar e reclamar inúmeras vezes.

Agradeço à Universidade Federal de Lavras e ao Departamento de Física, aos quais tenho muito orgulho de estarem presentes em minha trajetória.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

*"Nós somos aquilo que fazemos repetidamente."
(Aristóteles)*

RESUMO

O princípio da mínima ação é um dos mais importantes princípios da física e possui aplicações em diversas áreas. Tal princípio afirma que a trajetória pela qual um sistema evolui é aquela que possui a ação mínima. Por sua vez, no cenário de movimentos randômicos, devido ao fato de serem não determinísticos, ele não é diretamente aplicável. Portanto, para abordar este tipo de situação, desenvolvemos o princípio da mínima ação estocástico (PMAE), princípio este que deve reproduzir resultados análogos aos obtidos pelas integrais de trajetória. Para tanto, consideramos que a média da variação da ação clássica das possíveis trajetórias deve ser minimizada, obtendo assim os vínculos que a distribuição de probabilidade de trajetória de um movimento randômico deve obedecer. Utilizando o princípio de Jaynes, encontramos a distribuição de probabilidade de trajetória, que é proporcional ao inverso da exponencial da ação. Tomando este movimento como um sistema markoviano, associamos a probabilidade de cada ponto de uma trajetória com o ponto imediatamente anterior e obtemos a integral de trajetória. Ao considerarmos um ruído gaussiano, obtemos uma forma específica para a integral de trajetória e observamos que tal integral também é proporcional ao inverso da ação clássica. Para verificar a relação entre a ação e a probabilidade de trajetória, construímos uma simulação computacional para o movimento randômico com ruído gaussiano: i) em regime livre; ii) sob a influência de uma força constante e iii) sob a influência de uma força restaurativa, cujo resultados corroboraram os resultados preditos teoricamente pelo PMAE. Uma vez verificado o resultado para este tipo de ruído, aplicamos o formalismo à descrição de eventos tipo cisne negro. Tais eventos são raros e extremos, logo, para um sistema com sua ocorrência é necessário que os eventos nas extremidades das distribuições sejam probabilisticamente relevantes. Assim, devemos tomar distribuições com caudas pesadas e elegemos as distribuições estáveis que possuem esta característica e descrevem um processo de difusão anômala. Este tipo de processo é descrito por meio da equação de Fokker-Planck com operador diferencial espacial fracionário, um operador não local que resulta em interações de longo alcance. Devido à estas interações é necessária a modificação da entropia associada ao processo de difusão anômala, visto que a entropia de Shannon só é válida para sistemas com interações de curto alcance. Analogamente, utilizamos a entropia generalizada de Tsallis para obter a probabilidade de trajetória do movimento randômico com eventos tipo cisne negro e verificamos, por meio de simulações computacionais, a validade deste resultado.

Palavras-chave: Cisne negro. Entropia de Tsallis. Integrais de trajetória. Princípio de Jaynes. Processos estocásticos.

ABSTRACT

The least action principle is one of the most important physical principles and is applicable to many distinct areas of knowledge. This principle states that the trajectory in which a system evolves is the one with the minimal action. Therefore, within the scenery of randomic movements, due to the fact of not being a deterministic movement, it is not directly applicable. That means that to approach this kind of situation it was needed to develop the stochastic least action principle (SAP). This stochastic least action principle must reproduce analog results to those obtained by the trajectory integrals. To do so, it is considered that the mean of the variation of the classical action of the possible trajectories must be minimized, obtaining then, the constraints which the distribution of the trajectory probabilities of a movement must obey. Using the principle of Jaynes, the trajectory probability's distribution is found, being proportional to the inverse of the action's exponential. Taking this movement as a markovian system, it is possible to associate the probability of each mark of a trajectory to the immediately previous mark, obtaining the trajectory integral. Considering a gaussian noise, it is possible to obtain a specific shape for such trajectory integral and also to observe that the integral is proportional to the inverse of the classical action. To verify the relation between the action and the trajectory's probability, it has been built a computational simulation for the unidimensional random motion particles: i) within free regimen; ii) under the influence of a constant force and iii) under the influence of a restorative force, in which the results corroborate the relation predicted by the SAP. Once the results of the simulation with gaussian noise were verified, this formalism was applied to the description of black swan events. Such events are rare and extreme, therefore, for a system where it can occur, it is needed that events on the extremities of the distributions to be probabilistically relevant. To be so, heavy tailed distributions must be used, we elect stable distributions that have such characteristics and describe a process of anomalous diffusion. This kind of process is obtained by the equation of Fokker-Planck with a fractionary spatial-differential operator, a non-local operator which results on long-range correlations. Consequently it is needed to modify the entropy that describes an anomalous diffusion process, once the Shannon's entropy is only valid to systems with short range interactions. Analogously, the generalized entropy of Tsallis was used to obtain the randomic movements' trajectory probability with black swan events and it was verified, throughout computational simulations, the validity of this result.

Keywords: Black swan. Jaynes principle. Path integrals. Stochastic processes. Tsallis entropy

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Diagrama esquemático da evolução temporal de um sistema com 1 grau de liberdade no espaço de configurações.	16
Figura 2.2 – Diagrama esquemático das trajetórias $q(t)$ e $Q(t)$ no espaço de configurações.	17
Figura 2.3 – Diagrama esquemático do pêndulo simples.	23
Figura 2.4 – Órbita no espaço de fase para um pêndulo simples em regime de pequenas oscilações.	25
Figura 3.1 – Representação gráfica da distribuição normal, também conhecida como curva de sino, em que μ é a média e σ o desvio padrão.	28
Figura 4.1 – Representação gráfica de uma partícula se movendo do ponto x_1 até um possível ponto x_2 no eixo x	46
Figura 4.2 – Representação gráfica de uma partícula se movendo do ponto x_1 até um possível ponto x_n no eixo x por meio de n passos.	47
Figura 4.3 – Representação gráfica de uma partícula se movendo do ponto a até o ponto b no eixo x através de n passos.	51
Figura 4.4 – Possíveis trajetórias descritas pelas partículas para o caso do potencial nulo.	55
Figura 4.5 – Distribuição de probabilidade de trajetória em função da ação para o potencial nulo. A linha representa o fit da distribuição.	55
Figura 4.6 – Possíveis trajetórias descritas pelas partículas para o caso do potencial linear.	56
Figura 4.7 – Distribuição de probabilidade de trajetória em função da ação para o caso do potencial linear. A linha representa o fit da distribuição.	57
Figura 4.8 – Possíveis trajetórias descritas pelas partículas para o caso do potencial quadrático com restrição na distância.	58
Figura 4.9 – Distribuição de probabilidade de trajetória em função da ação para o potencial quadrático com restrição na distância. A linha representa o fit da distribuição.	58
Figura 4.10 – Possíveis trajetórias descritas pelas partículas para o caso do potencial quadrático com restrição na distância.	59
Figura 4.11 – Distribuição de probabilidade de trajetória em função da ação para o potencial quadrático com restrição na distância. A linha representa o fit da distribuição.	59

Figura 5.1 – Gráficos para diferentes casos específicos da distribuição estável.	65
Figura 6.1 – Representação das funções exponencial e q -exponencial.	72
Figura 7.1 – Simulações para os diferentes potenciais com $\alpha = 2$. Potencial nulo (esquerda), potencial linear (centro) e potencial quadrático (direita).	74
Figura 7.2 – Simulações para os diferentes potenciais com $\alpha = 1.75$. Potencial nulo (esquerda), potencial linear (centro) e potencial quadrático (direita).	74
Figura 7.3 – Simulações para os diferentes potenciais com $\alpha = 1.5$. Potencial nulo (esquerda), potencial linear (centro) e potencial quadrático (direita).	75
Figura 7.4 – Simulações para os diferentes potenciais com $\alpha = 1.25$. Potencial nulo (esquerda), potencial linear (centro) e potencial quadrático (direita).	75
Figura 7.5 – Simulações para os diferentes potenciais com $\alpha = 1$. Potencial nulo (esquerda), potencial linear (centro) e potencial quadrático (direita).	76
Figura 7.6 – Simulações para os diferentes potenciais com $\alpha = 0.75$. Potencial nulo (esquerda), potencial linear (centro) e potencial quadrático (direita).	76
Figura 7.7 – Simulações para os diferentes potenciais com $\alpha = 0.5$. Potencial nulo (esquerda), potencial linear (centro) e potencial quadrático (direita).	77
Figura 7.8 – Simulações para os diferentes potenciais com $\alpha = 0.25$. Potencial nulo (esquerda), potencial linear (centro) e potencial quadrático (direita).	77
Figura 7.9 – Simulações com filtro na energia, partículas livres e $\alpha = 1$	80
Figura 7.10 – Simulações com filtro na energia, partículas livres e $\alpha = 0.5$	81
Figura 7.11 – Simulações com filtro na energia, partículas sujeitas a uma força constante e $\alpha = 1$	82
Figura 7.12 – Simulações com filtro na energia, partículas sujeitas a uma força constante e $\alpha = 0,5$	83
Figura 7.13 – Simulações com filtro na energia, partículas sujeitas a uma força restaurativa e $\alpha = 1$	84
Figura 7.14 – Simulações com filtro na energia, partículas sujeitas a uma força restaurativa e $\alpha = 0.5$	85
Figura 7.15 – Simulações com distribuição estável truncada, partículas livres e $\alpha = 1$	88
Figura 7.16 – Simulações com distribuição estável truncada, partículas livres e $\alpha = 0.5$	89
Figura 7.17 – Simulações com distribuição estável truncada, partículas em aceleração constante e $\alpha = 1$	90

Figura 7.18 – Simulações com distribuição estável truncada, partículas em aceleração constante e $\alpha = 0.5$	91
Figura 7.19 – Simulações com distribuição estável truncada, partículas em oscilação harmônica e $\alpha = 1$	92
Figura 7.20 – Simulações com distribuição estável truncada, partículas em oscilação harmônica constante e $\alpha = 0.5$	93
Figura 7.21 – Gráfico da relação entre q e α para as simulações de movimento randômico com diferentes potenciais.	95

SUMÁRIO

1	Introdução	12
2	Tópicos em Mecânica Analítica	15
2.1	O princípio de Hamilton e a equação de Euler-Lagrange	15
2.1.1	Sistemas com vínculos na mecânica Lagrangiana	19
2.2	Mecânica Hamiltoniana	21
3	O princípio da mínima ação estocástico	26
3.1	O movimento randômico	26
3.2	Distribuições de probabilidade	27
3.3	A formulação do princípio da mínima ação estocástico	33
3.4	Princípio de Jaynes	34
3.4.1	A distribuição de probabilidade de posição do movimento browniano . . .	35
3.4.2	Obtenção da distribuição de probabilidade de trajetória	38
3.5	Casos de distribuição de probabilidade de trajetória	41
4	Integrais de Trajetória	45
4.1	Uma breve introdução sobre as integrais de trajetória	45
4.2	Integral de trajetória pelo formalismo de Wiener	46
4.3	O movimento randômico discreto com ruído gaussiano	49
4.3.1	Uma solução analítica para a integral de Wiener	51
4.3.2	Simulação computacional	53
5	Considerações sobre eventos tipo cisne negro	61
5.1	Distribuição estável	62
5.1.1	Distribuição de Lévy	63
5.1.2	Distribuição de Cauchy	64
5.2	Difusão anômala	65
6	Princípio da Mínima Ação Estocástico com eventos tipo cisne negro	68
6.1	A entropia de Tsallis ou q-entropia	68
6.2	Desenvolvimento da distribuição de probabilidade de trajetória	70
7	Simulações com a entropia de Tsallis	73
7.1	Resultados: simulações sem vínculos	74
7.2	Resultados: simulações com filtro na energia	79
7.2.1	Simulações para partículas livres	80

7.2.2	Simulações para Partículas sujeitas a uma força constante	82
7.2.3	Simulações para Partículas sujeitas a uma força restaurativa	84
7.3	Resultados: simulações com distribuições truncadas	87
7.3.1	Simulações para partículas livres	88
7.3.2	Simulações para partículas sujeitas a uma força constante	90
7.3.3	Simulações para partículas sujeitas a uma força restaurativa	92
7.4	Análise dos resultados	94
8	Conclusão	96
	REFERÊNCIAS	98
	APENDICE A – Transformação de Legendre	103
	APENDICE B – A generalização da integral gaussiana	106

1 INTRODUÇÃO

O princípio da mínima ação é um dos mais importantes formalismos da física visto sua simplicidade e grande aplicabilidade, possuindo aplicações em áreas como óptica (MARION, 2013), mecânica clássica (GOLDSTEIN; POOLE; SAFKO, 2002), teoria da relatividade geral (HOBSON; EFSTATHIOU; LASENBY, 2006) e teoria quântica de campos (SREDNICKI, 2007). Este princípio afirma que a evolução de um sistema ocorre pelo caminho no qual a ação é mínima (MARION, 2013). Sabendo que a ação é definida como a soma das diferenças entre a energia cinética e potencial calculada a cada instante de um processo, podemos concluir que a evolução de um sistema físico ocorre pelo caminho energeticamente mais eficiente.

No contexto de processos não determinísticos, o princípio da mínima ação está intimamente relacionado com o formalismo de integrais de trajetória que nos fornece a probabilidade de transição de um sistema de um estado a outro. Neste contexto, podemos citar as integrais de trajetória de Feynmann para a mecânica quântica (FEYNMAN et al., 1948) e as integrais de trajetória de Wiener para o movimento browniano (WIENER, 1921), sendo ambas proporcionais a um termo exponencial da ação. Além disso, as integrais de trajetória possuem inúmeras outras aplicações na física como em teoria quântica de campos, física estatística e física da matéria condensada (CHAICHIAN; DEMICHEV, 2018; KLEINERT, 2009); e para além dela como modelagens de ações e índices do mercado financeiro (LINETSKY, 1997; KLEINERT, 2002) e em sistemas biológicos, em uma área do conhecimento intitulada de *Biologia Quanticamente Inspirada* (PEASE, 2011).

Visto que o formalismo de integrais de trajetória é um território muito fértil, bem estabelecido no campo da física e que possui íntima relação com o conceito de ação, nos propomos a trabalhar com uma extensão do princípio da mínima ação para processos estocásticos (PMAE). Desta maneira, esperamos ser capazes de reproduzir resultados análogos aos obtidos pelas integrais de trajetória, porém utilizando a abordagem desenvolvida por meio deste princípio. Além disso, tal formulação é um esforço no sentido da compreensão da termodinâmica de não equilíbrio utilizando do conceito de movimento randômico (WANG, 2010b).

Para desenvolvermos o princípio da mínima ação estocástico (PMAE), substituímos a minimização da ação pela média da minimização da ação (LIN, 2013). Como consequência, encontramos um conjunto de vínculos que a distribuição de probabilidade de trajetória do sistema randômico deve satisfazer. Utilizando o princípio de Jaynes, que afirma que a distribuição de probabilidade ótima para descrever um sistema é aquela obtida ao maximizar a entropia de

informação em relação aos vínculos que o sistema está sujeito (JAYNES, 1957), encontramos a distribuição de probabilidade de trajetória para movimentos randômicos. Esta distribuição tem uma dependência exponencial da ação, assim como aquela observada no formalismo de integrais de trajetória; e por meio de simulações do movimento randômico utilizando a equação de Langevin com ruído gaussiano (CHAICHIAN; DEMICHEV, 2018), verificamos sua ocorrência.

Uma vez que verificamos o resultado do PMAE para o movimento randômico com distribuição gaussiana, nos dedicamos a estender este princípio para eventos tipo cisne negro. O conceito de evento tipo cisne negro foi cunhado por Taleb, um matemático e economista, usando o fato de que, para os europeus, todos os cisnes eram necessariamente brancos até a descoberta da Oceania no século XVII, onde foram encontrados cisnes negros. Taleb afirma, em um sentido epistemológico, que dentro das teorias científicas existe sempre a possibilidade de ocorrência de eventos inesperados, eventos tipo cisne negro (TALEB, 2007). Alguns exemplos de eventos deste tipo são: crises financeiras (WEATHERALL, 2013), a ocorrência de terremotos (HOUGH, 2009) e eventos astronômicos superenergéticos (MUTHUKRISHNA; LOCHNER; WEBB, 2019). Mais recentemente podemos lembrar do raro e grave acidente ocorrido na F1 com Romain Grosjean como não se via há anos (PASSOS, 2020) e o alerta de um tsunami na costa brasileira (NEWS, 2021; WARD; DAY, 2001). Na área de biologia, podemos encontrar aplicações do conceito no estudo de dinâmica populacional (ANDERSON et al., 2017); já na área da física podemos encontrar este conceito aplicado à física de altas energias (KLEINERT, 2014). Neste trabalho, como proposta original, utilizamos este conceito no contexto do movimento randômico para entender como o PMAE pode prever a probabilidade de trajetórias com este tipo de evento.

Uma vez que desejamos observar eventos extremos é necessário que a forma como os ruídos da equação de Langevin são governados seja modificada, desta maneira, substituímos a distribuição gaussiana pela distribuição estável com caudas pesadas. Tais caudas resultam em eventos extremos com maior relevância probabilística. Além disso, tal modificação na equação de Langevin resulta em um processo de difusão anômala (KLAGES; RADONS; SOKOLOV, 2008).

Existem diferentes maneiras de se descrever um processo de difusão anômalo utilizando modificações na equação de Fokker-Planck. Dentre elas temos a possibilidade de inserir um expoente de correlação, utilizar derivadas temporais e/ou espaciais fracionárias, sendo a primeira

opção o caso que equivale à descrição de Langevin com ruídos governados pela distribuição estável que considerada (KLAGES; RADONS; SOKOLOV, 2008), ou a combinação destes processos (PEDRON; MENDES, 2005). Para todos estes casos é possível inferir que a difusão anômala está intimamente relacionada com a entropia não-aditiva de Tsallis, assim como a entropia de Shannon-Boltzmann-Gibbs está relacionada com a difusão normal (TSALLIS; SOUZA; MAYNARD, 1995; TSALLIS et al., 1995; TSALLIS; LENZI, 2002; PLASTINO; PLASTINO, 1995; LENZI et al., 2003; KLAGES; RADONS; SOKOLOV, 2008; PREHL; ESSEX; HOFFMANN, 2012; ANDERSON; MORADI; RAFIQ, 2018; SANTOS, 2021).

Esta entropia não-aditiva foi proposta dentro do contexto de fenômenos multifractais como uma generalização da entropia de Boltzmann-Gibbs (TSALLIS, 1988). Esta extensão possibilitava o tratamento de sistemas mais gerais do que a entropia de Boltzmann-Gibbs, uma vez que a segunda limita-se a sistemas com interações de curto alcance (LANDSBERG, 1978). Ao passar dos anos inúmeras aplicações da entropia de Tsallis foram encontradas, como em sistemas caóticos, física de altas energias, ventos solares, buracos negros, mecânica quântica não linear, sistemas biológicos, sistemas complexos, economia e drenagem de silos (TSALLIS, 2021; BOUNTIS; VEERMAN; VIVALDI, 2020; XIAO et al., 2021; MAJHI, 2017). Desta maneira, para aplicar o PMAE em sistemas com eventos tipo cisne negro, naturalmente devemos recorrer à entropia generalizada.

Assim, motivados pelo amplo espectro de áreas abordadas por este trabalho, desenvolvemos cadencialmente os temas apresentados na introdução até, com o uso de simulações, culminarmos na verificação dos resultados do PMAE com eventos tipo cisne negro. Tais resultados são originais na literatura, reforçam a validade do PMAE para movimentos randômicos mais diversos que o movimento browniano e contribuem para aplicações em outros tipos de processos estocásticos com eventos extremos. Também temos como objetivo deste trabalho estudar estes formalismos de maneira clara para que o mestrando esteja apto a estudar, posteriormente, outras áreas da física nas quais eles estão inseridos. Há também, nas motivações que levaram à elaboração desse texto, o cuidado para que ele sirva como possível material didático para estudantes de física, por esta razão em alguns pontos existem exemplificações de casos simples para ilustrar a aplicação do conteúdo apresentado no texto.

2 TÓPICOS EM MECÂNICA ANALÍTICA

A mecânica é a área da física que lida com os fenômenos relacionados ao movimento e ao repouso. Dentre os diferentes pontos de vista, os principais fazem uso do conceito de energia ou força. Nos formalismos que procedem do princípio da mínima ação, o conceito de energia ocupa um papel primordial, já no formalismo de Newton a força é o conceito central para descrevermos sistemas mecânicos.

Nesse capítulo vamos apresentar o princípio da mínima ação para a mecânica clássica e os formalismos que resultam dessa formulação: o formalismo de Lagrange e de Hamilton. Tais formalismos serão úteis na compreensão e obtenção de grandezas importantes para a formulação do princípio da mínima ação estocástico e na descrição de integrais de trajetória, pontos centrais de nosso trabalho.

2.1 O princípio de Hamilton e a equação de Euler-Lagrange

A percepção de que um fenômeno da natureza pode ser descrito por meio da minimização de uma quantidade percorreu o desenvolvimento da física desde o seu início. Heron de Alexandria (75 a.C.) propôs que a trajetória para a propagação de um raio de luz entre dois pontos deve ocorrer por meio do menor caminho entre eles. Posteriormente, Fermat (1662) mostra que a minimização do tempo de propagação da luz resulta na trajetória que ela percorre entre esses dois pontos. Maupertuis (1744) insere o conceito de ação nessa formulação e mostra que a luz se propaga pelo caminho com menor ação. Euler (1744) e Hamilton (1834) estendem a ideia de menor ação para a mecânica clássica, mostrando que as equações de movimento de um sistema podem ser obtidas por meio da minimização dessa grandeza. Mais tarde, Einstein e Hilbert (1916) estendem essa formulação para a Teoria da Relatividade Geral e Feynman (1948) para a Mecânica Quântica (MOREIRA, 1999). Por meio desse breve histórico podemos verificar a abrangência e generalidade do princípio da mínima ação.

O princípio da mínima ação, também conhecido como princípio de Hamilton, nos diz que para um sistema evoluir do instante t_1 até o instante t_2 a trajetória que ele irá tomar, dentre todas as infinitas possíveis trajetórias, será aquela na qual a ação é mínima ou, de modo mais geral, estacionária (MARION, 2013).

Para prosseguir com a formulação matemática do princípio de Hamilton precisamos primeiro definir uma grandeza conhecida como Lagrangiana ($\mathcal{L}$). Tal grandeza é definida como

a diferença entre a energia cinética (T) e a energia potencial (U) (MARION, 2013), ou seja,

$$\mathcal{L}[q_i(t), \dot{q}_i(t), t] = T - U, \quad (2.1)$$

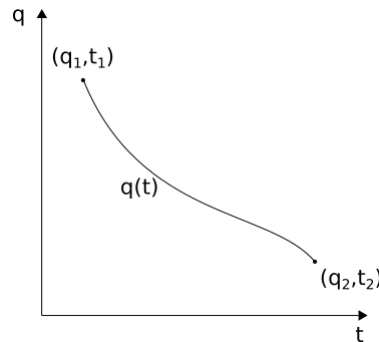
em que q_i são as i -ésimas coordenadas generalizadas e $\dot{q}_i = \frac{dq_i}{dt}$ as i -ésimas velocidades generalizadas¹. As coordenadas generalizadas q_i de um sistema com n graus de liberdade² definem o que é chamado de espaço de configurações com dimensão igual a n , em que o tempo é um parâmetro.

Para um sistema com $n = 1$ grau de liberdade a ação, ou ação lagrangiana, é definida como o funcional³ (GOLDSTEIN; POOLE; SAFKO, 2002)

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(q, \dot{q}, t) dt, \quad (2.2)$$

sendo que em t_1 o sistema está em um ponto q_1 e em t_2 em q_2 . Veja a figura 2.1.

Figura 2.1 – Diagrama esquemático da evolução temporal de um sistema com 1 grau de liberdade no espaço de configurações.



Fonte: autor

Se o princípio de Hamilton nos diz que a trajetória da evolução temporal do sistema é a que tem a ação mínima e se sabemos que a ação é a soma da diferença entre energia cinética e potencial calculada a cada instante, então a trajetória pela qual um sistema irá evoluir é a que tem menor variação de energia, ou seja, a trajetória mais eficiente em relação à variação da energia.

¹ As coordenadas e as velocidades escritas em sistemas de coordenadas arbitrários.

² A quantidade de graus de liberdade é a quantidade de coordenadas necessárias para descrever o sistema.

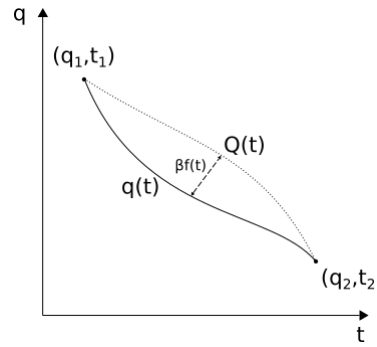
³ Um funcional, em linhas gerais, é uma "função" que tem como argumento uma função e como resultado um escalar (FLORES, 2011). Podemos citar como exemplo as integrais definidas. Seja o funcional $F[f(x)] = \int_0^1 f(x)dx$ e o argumento $f(x) = x$, temos que $F[x] = 1$.

Podemos, portanto, obter as equações de movimento por meio da minimização da ação utilizando cálculo variacional (GOLDSTEIN; POOLE; SAFKO, 2002). Tomando que $q(t)$ é a equação da trajetória que tem a ação minimizada, podemos definir a equação de uma segunda trajetória com um desvio na forma

$$Q(t) = q(t) + \beta f(t), \quad (2.3)$$

sendo β uma constante positiva, o que nos garante que a ação através desta trajetória será maior do que a ação através da trajetória clássica e $f(t)$ a função que nos dá como as trajetórias se diferenciam em função de t . Veja a figura 2.2.

Figura 2.2 – Diagrama esquemático das trajetórias $q(t)$ e $Q(t)$ no espaço de configurações.



Fonte: autor

Esta nova trajetória também deve cumprir as condições de contorno que a trajetória original satisfaz, ou seja,

$$q_1(t) - Q_1(t) = 0 \quad \text{e} \quad q_2(t) - Q_2(t) = 0, \quad (2.4)$$

isto corresponde a dizer que $Q(t)$ e $q(t)$, embora sejam curvas distintas, compartilham o mesmo ponto inicial e final.

Reescrevendo a ação (2.2) para a trajetória com desvio temos

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}[Q(t), \dot{Q}(t), t] dt = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}[q + \beta f, \dot{q} + \beta \dot{f}, t] dt. \quad (2.5)$$

Observe que ao computarmos esta integral o resultado que encontraremos dependerá apenas de β , assim podemos dizer que S é função de β . Se queremos que a ação seja mínima devemos então calcular $\left. \frac{\partial S}{\partial \beta} \right|_{\beta=0} = 0$, encontrando o valor mínimo da ação (S) para a trajetória clássica,

uma vez que $\beta = 0$. Fazendo o cálculo da variação de S em função de β encontramos

$$\frac{\partial S(\beta)}{\partial \beta} = \frac{\partial}{\partial \beta} \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}[q + \beta f, \dot{q} + \beta \dot{f}, t] dt = 0. \quad (2.6)$$

Como a integral é independente de β podemos inverter a ordem de derivação e integração. Assim, por meio da regra da cadeia e utilizando o método de integração por partes, temos

$$\left[f(t) \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right]_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} f(t) \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right) dt = 0. \quad (2.7)$$

Devido às condições de contorno (2.4) sabemos que $f(t_1) = f(t_2) = 0$, logo o primeiro termo será nulo e para que o segundo termo também se anule, uma vez que $f(t)$ é arbitrária, basta que

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} = 0. \quad (2.8)$$

Esta é a equação de Euler-Lagrange, a equação de movimento no contexto da mecânica lagrangiana.

A equação de Euler-Lagrange, ao ser satisfeita, nos dá a trajetória que minimiza a ação, ou seja, a trajetória pela qual o sistema irá evoluir. Para um sistema com n graus de liberdade, a equação de Euler-Lagrange será um conjunto de n equações, cada uma associada a sua coordenada, resultando na forma

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}, \text{ com } i = 1, 2, 3 \dots n. \quad (2.9)$$

Aqui apresentamos o cálculo diferencial aplicado na minimização da ação, porém este formalismo pode ser utilizado para extremizar inúmeras grandezas funcionais. Além disso, outros parâmetros diferentes de t podem ser utilizados na equação (2.8). Para ilustrar o formalismo lagrangiano, desenvolveremos a seguir o caso de uma partícula sob a influência de um campo conservativo⁴. Elegemos este problema pois campos conservativos são recorrentes em situações físicas, por exemplo o campo elétrico e o campo gravitacional.

⁴ Um campo conservativo é aquele em que a integral de linha tem seu resultado independente do caminho tomado, implicando que o trabalho realizado por um deslocamento dentro do campo depende apenas dos pontos inicial e final. Matematicamente, se temos o campo $\vec{f}(x)$, o campo conservativo obedece $\oint \vec{f}(x) \cdot d\vec{l} = 0$ (GRIFFITHS, 2013).

Uma partícula sob a influência de um campo conservativo

Se uma partícula está sob a ação de um campo conservativo que lhe confere um potencial (U), pela definição da Lagrangiana (2.1) temos para este sistema

$$\mathcal{L}(\dot{x}, \dot{y}, x, y) = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) - U(x, y), \quad (2.10)$$

em que utilizamos o sistema de coordenadas cartesiano. Utilizando as equações de Euler-Lagrange para cada coordenada, encontramos para x :

$$-\frac{\partial U}{\partial x} = \frac{d}{dt}(m\dot{x}) \quad (2.11)$$

e para y :

$$-\frac{\partial U}{\partial y} = \frac{d}{dt}(m\dot{y}). \quad (2.12)$$

Observe que os resultados encontrados, equações (2.11) e (2.12), são compatíveis com a segunda lei de Newton. Para fazermos esta identificação devemos recordar que a derivada do potencial em relação à posição é igual a força e que a segunda lei de Newton tem a forma (NUSSENZVEIG, 2013)

$$\vec{F} = \frac{d}{dt}\vec{p} = \dot{\vec{p}}. \quad (2.13)$$

Comparando a segunda lei de Newton (2.13) e a equação de Euler-Lagrange (2.8), obtemos as relações

$$\dot{p}_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i}, \quad (2.14)$$

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}, \quad (2.15)$$

conhecidas, respectivamente, como força generalizada e momento generalizado.

2.1.1 Sistemas com vínculos na mecânica Lagrangiana

Quando pensamos sobre os fenômenos presentes na natureza, vínculos são fundamentais para compreendê-los, uma vez que são eles que condicionam a forma como um sistema se comporta. Vínculos estão presentes nos mais variados tipos de fenômenos: o fio que limita um pêndulo ao oscilar, a influência gravitacional do Sol sob a qual a Terra translada, o potencial eletromagnético que confina um elétron ao núcleo atômico, são exemplos de vínculos.

Dessa maneira, tratar matematicamente essas condições é um passo importante para descrever o que observamos. Nessa subseção apresentaremos como podemos tratar vínculos utilizando o formalismo de Lagrange e observaremos sua simplicidade quando comparada ao tratamento newtoniano.

Sistemas com vínculos são sistemas que possuem restrições, que podem ou não depender do tempo. Para sistemas lagrangianos essas restrições são classificadas em dois tipos: vínculos holonômicos e não-holonômicos. Vínculos holonômicos são vínculos em que as restrições podem ser escritas apenas em função das coordenadas generalizadas, do contrário, são vínculos não-holonômicos. Aqui trataremos somente a classe de vínculos holonômicos que denotamos por $f(q_i, t)$.

Para descrever um sistema com vínculos construímos as equações de vínculo com a seguinte forma: $f(q_i, t) = 0$, assim podemos reescrever a lagrangiana como

$$\mathcal{L}'(q_i, \dot{q}_i, \lambda_\alpha, t) = \mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i) + \lambda_\alpha f_\alpha(q_i, t), \quad (2.16)$$

em que λ_α são os multiplicadores de Lagrange que tratamos como uma coordenada e f_α as equações de vínculo.

Aplicando a equação de Euler-Lagrange (2.8) na equação (2.16), temos:

- Para λ_α :

$$\frac{\partial \mathcal{L}'}{\partial \lambda_\alpha} = f_\alpha(q_i, t) = 0. \quad (2.17)$$

- Para q_i :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} + \lambda_\alpha \frac{\partial f_\alpha}{\partial q_i} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}'}{\partial \dot{q}_i} \right). \quad (2.18)$$

Por meio dos resultados (2.17) e (2.18) podemos inferir que a equação de Euler-Lagrange para as novas variáveis λ_α implica nas equações de vínculos. Por outro lado, determinar a equação de Euler-Lagrange para as variáveis q_i resulta em um novo termo adicional do lado das forças generalizadas; evidentemente, a dimensão deste termo também deve ser a de uma "força generalizada", portanto este termo é interpretado como a força do vínculo (f_α) para a

coordenada (q_i). Desta forma, as forças de vínculo ($F_{\alpha i}$) são obtidas com

$$F_{\alpha i} = \lambda_{\alpha} \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial q_i}. \quad (2.19)$$

Por meio do método de multiplicadores de Lagrange podemos descrever um sistema com vínculos sem precisar nos atermos às forças que geram esses vínculos – o mesmo não é possível no formalismo newtoniano. Essa é uma grande vantagem do formalismo lagrangiano quando comparado ao formalismo newtoniano na descrição de sistemas com vínculos.

É importante ressaltar que esse processo pode ser realizado para a extremização de qualquer grandeza sob restrições. Um exemplo de aplicação do uso de multiplicadores de Lagrange pode ser encontrado nas seções 3.4.1 e 3.4.2, onde maximizamos a entropia de Shannon para dois sistemas probabilísticos com vínculos distintos.

2.2 Mecânica Hamiltoniana

O formalismo de Hamilton pode ser encontrado com aplicações em diferentes áreas da física. Na mecânica clássica, o utilizamos para encontrar as equações de movimento de um sistema, como mostraremos a seguir. Na mecânica quântica, ele está presente na formulação de Heisenberg para obter a evolução temporal de operadores associados ao sistema físico (COHEN-TANNOUDJI; DIU; LALOË, 1977). Além disso, temos uma conexão clara entre a mecânica clássica e a mecânica quântica por meio da quantização canônica (NETO, 2004). Na mecânica estatística, ele pode ser encontrado na formulação da função de partição (SALINAS, 1997). Este é, portanto, um formalismo importante na física moderna.

A formulação hamiltoniana desempenha um papel importante na descrição de algumas distribuições de probabilidade que, por sua vez, serão importantes para descrição de processos estocásticos. Podemos citar, por exemplo, a distribuição de probabilidade de Lévy, que utiliza a hamiltoniana na sua formulação.

O funcional hamiltoniano, ou simplesmente hamiltoniana, grandeza central no formalismo de Hamilton, está relacionado com a lagrangiana por meio de uma transformação de Legendre com a forma

$$\mathcal{H}(q_i, p_i, t) = p_i \dot{q}_i - \mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i, t), \quad (2.20)$$

em que utilizamos a convenção de Einstein⁵.

A transformação de Legendre é uma maneira de reescrever uma função em uma forma conveniente sem perder as informações que a função original possui, para maiores detalhes veja o Apêndice A. No caso da transformação da lagrangiana para a hamiltoniana obtemos algumas vantagens: a hamiltoniana é igual a energia total do sistema se estiver escrita em função de coordenadas naturais⁶; as equações de movimento, embora sejam em maior número, duas para cada grau de liberdade (n), são de primeira ordem.

Para obter as equações de movimento na formulação hamiltoniana consideramos que a variação da hamiltoniana deve ser da forma

$$\delta \mathcal{H}(q_i, p_i, t) = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \delta p_i + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} \delta t \quad (2.21)$$

logo, a variação da hamiltoniana definida em (2.20)

$$\delta \mathcal{H}(q_i, p_i, t) = p_i \delta \dot{q}_i + \dot{q}_i \delta p_i - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} \delta q_i - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \delta t. \quad (2.22)$$

Substituindo (2.14) e (2.15) em (2.22), encontramos

$$\delta \mathcal{H}(q_i, p_i, t) = \dot{q}_i \delta p_i - \dot{p}_i \delta q_i - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \delta t. \quad (2.23)$$

Igualando (2.21) e (2.23), e em seguida mapeando os coeficientes de δp_i , δq_i e δt , temos

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i}, \quad (2.24)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \quad (2.25)$$

e

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t}. \quad (2.26)$$

O conjunto das equações (2.24) e (2.25) são conhecidas como as equações de Hamilton, também chamadas de equações canônicas, em que podemos observar o fato supramencionado de que as equações de Hamilton são um conjunto de $2n$ equações de primeira ordem. A equação (2.26)

⁵ O somatório em um índice fica implícito quando temos índices repetidos. Dizemos que estes índices estão contraídos ou que eles são mudos. Por exemplo: $\sum_i a_i b_i \equiv a_i b_i$.

⁶ Coordenadas em que a relação entre as coordenadas generalizadas e cartesianas é independente do tempo (TAYLOR, 2005).

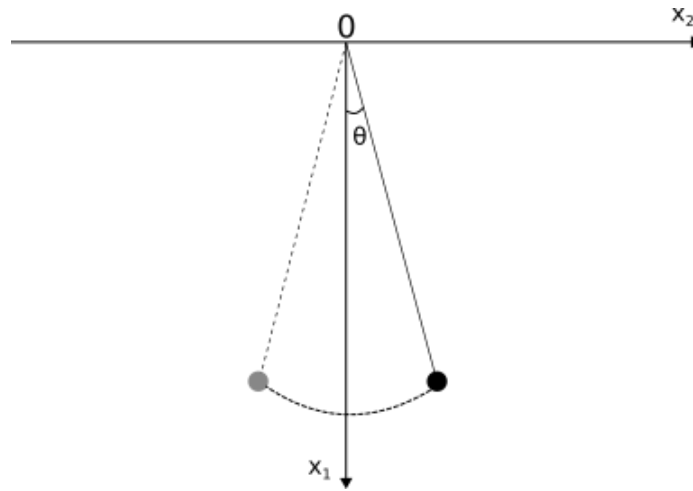
nos dá uma relação entre a lagrangiana e a hamiltoniana em que podemos observar que suas respectivas taxas de crescimento são inversamente proporcionais.

Para ilustrar a utilização do formalismo de Hamilton faremos o estudo de um pêndulo simples na seção a seguir.

O pêndulo simples

O pêndulo simples é uma boa maneira de exemplificar uma representação no espaço de fase. Seja um pêndulo simples e ideal⁷ em que um sistema de coordenadas (x_1, x_2) tem sua origem posicionada no ponto onde o pêndulo está fixo. A coordenada θ é o ângulo formado entre o pêndulo e o eixo x_1 , l é o comprimento da haste e m a massa que oscila, veja a figura 2.3.

Figura 2.3 – Diagrama esquemático do pêndulo simples.



Fonte: autor

Temos a lagrangiana desse sistema

$$\mathcal{L}(\theta, \dot{\theta}) = \frac{1}{2}ml^2\dot{\theta}^2 + mgl \cos \theta. \quad (2.27)$$

Utilizamos a equação (2.15) para obter a velocidade generalizada em função do momento generalizado para podermos escrever a hamiltoniana,

$$p_\theta = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\theta}} = ml^2 \dot{\theta}, \quad (2.28)$$

⁷ Um pêndulo composto apenas por uma partícula presa por um fio inextensível e de massa desprezível.

ou seja,

$$\dot{\theta} = \frac{p_{\theta}}{ml^2}. \quad (2.29)$$

Usando a definição (2.20), podemos expressar a hamiltoniana como

$$\mathcal{H}(p, \theta) = \frac{p_{\theta}^2}{2ml^2} - mgl \cos \theta. \quad (2.30)$$

Se consideramos que o pêndulo oscila próximo à sua posição de equilíbrio, ou seja, realiza pequenas oscilações⁸, podemos considerar uma expansão ao redor de $\theta = 0$, obtendo

$$\cos \theta \approx 1 - \frac{\theta^2}{2} + \mathcal{O}(\theta^4). \quad (2.31)$$

Fazendo a substituição de (2.31) em (2.30) temos

$$\mathcal{H}(p, \theta) = \frac{p_{\theta}^2}{2ml^2} + \frac{mgl\theta^2}{2} - mgl, \quad (2.32)$$

que podemos reorganizar como

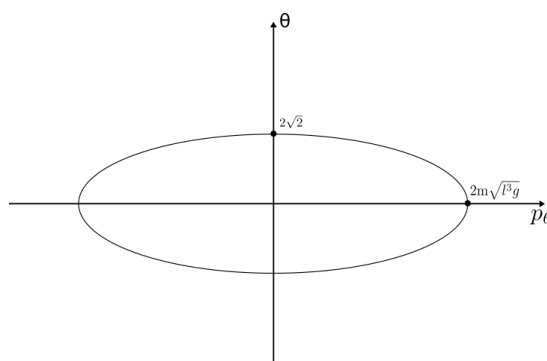
$$\frac{\mathcal{H} + mgl}{mgl} = \frac{p_{\theta}^2}{2m^2l^3g} + \frac{\theta^2}{2}. \quad (2.33)$$

A equação acima pode ser identificada como a equação de uma elipse de eixo maior $2m\sqrt{l^3g}$ e eixo menor $2\sqrt{2}$, ou seja, ao plotarmos a equação (2.33) no espaço de fase teremos uma órbita elíptica. O pêndulo simples, sob a condição de pequenas oscilações, tem o mesmo comportamento que um oscilador harmônico, ou seja, o de um estado ligado⁹. Observe que esse fato não ocorre para o pêndulo com grandes oscilações, pois (2.30) é uma órbita aberta no espaço de fase e não um estado ligado.

⁸ Quando consideramos apenas pequenas oscilações obtemos frequências que são independentes da amplitude de oscilação – osciladores lineares. A relação entre a força restaurativa e o deslocamento é linear (GHOSH, 2016).

⁹ Estados em que a energia cinética é menor do que a energia potencial.

Figura 2.4 – Órbita no espaço de fase para um pêndulo simples em regime de pequenas oscilações.



Fonte: autor

A representação ilustrada na figura 2.4 é conhecida como espaço de fase, a representação gráfica de sistemas hamiltonianos. Uma importante característica do espaço de fase é que um dado ponto (configuração) determina um estado específico do sistema, de forma que as linhas do espaço de fase não podem se cruzar.

3 O PRINCÍPIO DA MÍNIMA AÇÃO ESTOCÁSTICO

Uma vez que apresentamos o princípio da mínima ação para sistemas clássicos iremos trabalhar em uma extensão desse princípio para processos estocásticos para a descrição de movimentos randômicos. Nesse capítulo apresentaremos as características gerais desse movimento, a caracterização de distribuições de probabilidade e a formulação do princípio da mínima ação estocástico. Com posse do princípio da mínima ação estocástico discutiremos o princípio de Jaynes para obter as distribuições de probabilidade adequadas para as posições de uma partícula browniana e para as trajetórias do movimento randômico. Por fim, apresentaremos as distribuições de trajetórias para alguns exemplos.

3.1 O movimento randômico

O movimento randômico é um movimento que não tem uma previsão determinística, causado pela presença de ruídos ou forças randômicas¹, dizemos, portanto, que é um sistema estocástico. Os formalismos da mecânica clássica não são capazes de descrever esse movimento, ou seja, conhecer o estado inicial do sistema não nos garante que saibamos a trajetória que será percorrida, existe uma multiplicidade de possíveis trajetórias (WANG, 2010a).

O movimento randômico é considerado um processo estocástico. Tais processos consistem em um conjunto de variáveis aleatórias (x) que evoluem indexadas por um parâmetro (t), usualmente o tempo. Essas variáveis (x_t) são chamadas de funções estocásticas. Quando o parâmetro (t) evolui com valores discretos dizemos que temos uma cadeia estocástica, com valores contínuos um processo estocástico e quando em mais de uma dimensão um campo estocástico (CHAICHIAN; DEMICHEV, 2018). Um exemplo de cadeia estocástica são as posições de uma partícula performando um movimento browniano em uma aproximação discreta, como veremos a seguir.

O movimento browniano recebe esse nome por causa de Robert Brown, um botânico que, ao estudar o pólen² suspenso em um meio aquoso, observou o movimento aleatório e incessante dessas partículas. Após as publicações de Brown no séc XIX, alguns esforços foram feitos no sentido de compreender o movimento browniano, porém os estudos se concentravam em observar as velocidades ($\Delta x/\Delta t$) das partículas utilizando microscópios. Acontece que a

¹ Forças que são experimentadas de maneira aleatória. Por exemplo as forças que partículas brownianas suspensas em um líquido experimentam devido ao movimento térmico. Também podemos categorizá-las como forças sob as quais não podemos teorizar.

² Pequenos grãos onde estão os gametas masculinos das flores com dimensão aproximada de $5 \sim 6 \mu m$.

trajetória das partículas no movimento browniano são extremamente irregulares (não são diferenciáveis em muitos pontos) e por isso essa estratégia não foi eficaz ao explicar o movimento. Somente em 1905 Einstein publica um artigo sobre o movimento browniano levando em consideração a pressão osmótica realizada pelas partículas suspensas em um fluido, elevando, assim, a compreensão física e matemática do problema (EINSTEIN, 1906).

3.2 Distribuições de probabilidade

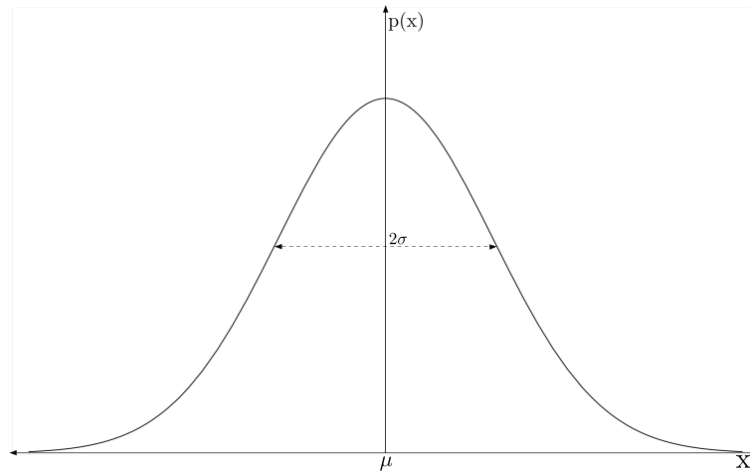
As distribuições de probabilidade são uma importante ferramenta para o estudo de sistemas estocásticos, uma vez que sabemos que as suas variáveis são distribuídas de maneira aleatória. No contexto do movimento randômico as posições das partículas e a probabilidade de ocorrência das trajetórias são descritas dessa maneira. Por essa razão, faremos um pequeno estudo sobre distribuições de probabilidade (DEVORE, 2011; MONTGOMERY; RUNGER, 2005; MAZO, 2002; CASELLA; BERGER, 2002; OLIVEIRA, 2001).

Uma distribuição de probabilidade apresenta a probabilidade de ocorrência de uma dada variável ao longo de seus possíveis valores. Uma distribuição extremamente importante é a distribuição gaussiana ou distribuição normal. Podemos fazer essa afirmação pois uma grande quantidade de fenômenos naturais, como características físicas de uma população, indicadores econômicos, medições de erro em experimentos, apresentam essa distribuição (PEARSON; LEE, 1903). A distribuição gaussiana pode ser expressa como:

$$g(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (3.1)$$

em que x é a variável distribuída e os parâmetros σ e μ são, respectivamente, denominados desvio padrão e média (veja a imagem 3.1.)

Figura 3.1 – Representação gráfica da distribuição normal, também conhecida como curva de sino, em que μ é a média e σ o desvio padrão.



Fonte: autor

Para caracterizar e obter informações de uma distribuição, uma ferramenta útil são os seus momentos. Eles estão definidos na forma de valores esperados, ou seja,

$$E(X^n) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^n p(x) dx, \quad (3.2)$$

em que $p(x)$ é uma distribuição de probabilidade qualquer da variável x . Dizemos que $E(X^n)$ é o n -ésimo momento da distribuição $p(x)$.

Embora a definição apresentada em (3.2) seja elucidativa do significado dos momentos, essa não é a melhor maneira para obter tal grandeza, uma vez que, em geral, a integral que aparece na definição não é trivial de se calcular. Uma forma mais simples para obter os momentos é utilizando a função geratriz de momentos e a função característica (OLIVEIRA, 2001). A função característica de uma distribuição de probabilidade é definida por

$$\phi(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{itx} p(x) dx, \quad (3.3)$$

a transformada de Fourier da distribuição de probabilidade. Utilizando a função característica (3.3), a função geratriz de momentos é definida como

$$M(t) = \phi(-it), \quad (3.4)$$

ou seja, a transformação de variáveis, $t \rightarrow -it$, aplicada à função característica. Para gerar os momentos, fazemos

$$E(X^n) = \left. \frac{d^n}{dt^n} M(t) \right|_{t=0}. \quad (3.5)$$

Embora a obtenção da função característica possa ser complexa, a determinação dos momentos se torna mais simples com o uso da equação (3.5).

Com posse dos momentos da distribuição, podemos obter algumas grandezas que caracterizam as distribuições de probabilidade:

- Média:

$$\bar{X} = E(X), \quad (3.6)$$

indica a região de concentração da variável dessa distribuição, isto é, o valor esperado da variável x

- Variância:

$$V(X) = E \left[(X - E(X))^2 \right], \quad (3.7)$$

indica o nível de dispersão da distribuição da variável.

- Parâmetro de assimetria:

$$\beta = \frac{E [X - E(X)]^3}{\left\{ E \left[(X - E(X))^2 \right] \right\}^{\frac{3}{2}}}, \quad (3.8)$$

indica o grau de assimetria da distribuição. Em inglês é chamado de *skewness*.

- Curtose:

$$\kappa = \frac{E \left[(X - E(X))^4 \right]}{\left\{ E \left[(X - E(X))^2 \right] \right\}^2}, \quad (3.9)$$

indica a intensidade com que as caudas da distribuição³ decaem para zero.

Os parâmetros da distribuição gaussiana

Para caracterizar a distribuição gaussiana e ilustrar o cálculo dos parâmetros acima citados, faremos o cálculo destes parâmetros para a distribuição normal. Primeiramente necessita-

³ As caudas da distribuição são as suas extremidades onde encontram-se os valores mínimos e máximos da variável distribuída.

mos calcular a função característica para (3.1) por meio de (3.3), fazemos

$$\begin{aligned}\phi(t) &= \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(itx) \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) dx \\ &= \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{-[x^2 - 2(\mu + it\sigma^2)x] - \mu^2}{2\sigma^2}\right) dx,\end{aligned}\quad (3.10)$$

utilizando o método de completar quadrados, identificamos

$$x^2 - 2(\mu + it\sigma^2)x = [x - (\mu + it\sigma^2)]^2 - (\mu + it\sigma^2)^2, \quad (3.11)$$

desta maneira a equação (3.10) pode ser escrita como

$$\phi(t) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{(\mu + it\sigma^2)^2 - \mu^2}{2\sigma^2}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{-[x - (\mu + it\sigma^2)]^2}{2\sigma^2}\right) dx. \quad (3.12)$$

Utilizando a solução para integrais gaussianas

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-a(x-b)^2] dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad (3.13)$$

a integral presente na equação (3.12) resulta em

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{-[x - (\mu + it\sigma^2)]^2}{2\sigma^2}\right) dx = \sqrt{2\sigma^2\pi}. \quad (3.14)$$

Substituindo o resultado (3.14) em (3.12), temos

$$\begin{aligned}\phi(t) &= \exp\left(\frac{(\mu + it\sigma^2)^2 - \mu^2}{2\sigma^2}\right) \\ &= \exp\left(i\mu t - \frac{1}{2}(\sigma t)^2\right),\end{aligned}\quad (3.15)$$

sendo (3.15) a função característica da distribuição gaussiana.

De posse da função característica, podemos calcular a função geratriz de momentos a partir da equação (3.4). Assim, temos como função geratriz de momentos da distribuição gaussiana,

$$M(t) = \phi(-it) = \exp\left(\mu t + \frac{1}{2}(\sigma t)^2\right), \quad (3.16)$$

Para obter a média, a variância e a curtose precisamos determinar os quatro primeiros momentos da distribuição. Por essa razão, utilizando (3.5), calculamos os respectivos momentos para a distribuição gaussiana a seguir.

- Primeiro momento:

$$\begin{aligned}
 E(X) &= \left. \frac{d}{dt} M(t) \right|_{t=0} \\
 &= \left[(\mu + \sigma^2 t) \exp \left(\mu t + \frac{1}{2} (\sigma t)^2 \right) \right] \Big|_{t=0} \\
 &= \mu
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

- Segundo momento:

$$\begin{aligned}
 E(X^2) &= \left. \frac{d^2}{dt^2} M(t) \right|_{t=0} \\
 &= \left[(\sigma^2) \exp \left(\mu t + \frac{1}{2} (\sigma t)^2 \right) + (\mu + \sigma^2 t)^2 \exp \left(\mu t + \frac{1}{2} (\sigma t)^2 \right) \right] \Big|_{t=0} \\
 &= \sigma^2 + \mu^2.
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

- Terceiro momento:

$$\begin{aligned}
 E(X^3) &= \left. \frac{d^3}{dt^3} M(t) \right|_{t=0} \\
 &= \left\{ \left[(\sigma^2) (\mu + \sigma^2 t) + 2 (\mu + \sigma^2 t) (\sigma^2) + (\mu + \sigma^2 t)^3 \right] \exp \left(\mu t + \frac{1}{2} (\sigma t)^2 \right) \right\} \Big|_{t=0} \\
 &= 3\mu\sigma^2 + \mu^3
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

- Quarto momento:

$$\begin{aligned}
 E(X^4) &= \left. \frac{d^4}{dt^4} M(t) \right|_{t=0} \\
 &= \left\{ \left[3\sigma^4 + 36 (\mu + \sigma^2 t) (\sigma^2) + (\mu + \sigma^2 t)^4 \right] \exp \left(\mu t + \frac{1}{2} (\sigma t)^2 \right) \right\} \Big|_{t=0} \\
 &= 3\sigma^4 + 6\mu^2\sigma^2 + \mu^4.
 \end{aligned} \tag{3.20}$$

De fato, podemos observar que o cálculo dos momentos centrais, utilizando a função geratriz, é simples se comparado a obtenção dos momentos centrais por meio do cálculo dos valores esperados.

Uma vez obtidos os quatro primeiros momentos, podemos calcular a média, a variância, o parâmetro de assimetria e a curtose da distribuição gaussiana. A média (3.6) será

$$\bar{X} = E(X) = \mu; \quad (3.21)$$

a variância (3.7)

$$V(X) = E \left[(X - E(X))^2 \right] = \sigma^2; \quad (3.22)$$

o parâmetro de assimetria

$$\beta = \frac{E [X - E(X)]^3}{\left\{ E \left[(X - E(X))^2 \right] \right\}^{\frac{3}{2}}} = 0; \quad (3.23)$$

e a curtose

$$\kappa = \frac{E \left[(X - E(X))^4 \right]}{\left\{ E \left[(X - E(X))^2 \right] \right\}^2} = 3. \quad (3.24)$$

Obtivemos, assim, quatro importantes parâmetros que caracterizam a distribuição gaussiana; a concentração da variável, o nível de dispersão, a assimetria e a intensidade com que ela decai para zero. Classificamos as distribuições com relação às suas caudas tomando como referência a distribuição gaussiana. Distribuições com curtoses menores que 3 possuem as chamadas caudas leves e são nomeadas platicúrticas, com curtoses maiores que 3 possuem caudas pesadas, chamadas leptocúrticas e, por sua vez, distribuições com curtoses muito próximas à 3 são chamadas de mesocúrticas (PEARSON, 1905). Quanto maior a curtose de uma distribuição, maior será a probabilidade de ocorrência de eventos extremos, uma vez que a quantidade de eventos distribuídos nas caudas (extremidades) será maior.

Nas seções a seguir veremos que a distribuição gaussiana será utilizada para descrever o tipo de movimento randômico que tomaremos como protótipo, o movimento browniano.

3.3 A formulação do princípio da mínima ação estocástico

Para desenvolvermos um princípio da mínima ação estocástico precisamos entender que, no contexto do movimento randômico, o que causa o fenômeno de aleatoriedade do movimento são forças randômicas, e não é possível levá-las em consideração nas grandezas fundamentais da mecânica clássica devido à sua natureza aleatória. Logo, a lagrangiana ($\mathcal{L}$), a hamiltoniana ($\mathcal{H}$) e a ação (A)⁴ não sofrerão alterações em suas definições. Devido à multiplicidade de possíveis trajetórias teremos que trabalhar com probabilidades, portanto, consideraremos que um mesmo sistema realiza inúmeras vezes o mesmo processo para que possamos calcular resultados com significância estatística. Ao proceder dessa maneira, o princípio da mínima ação estocástico será dado pela condição $\overline{\delta A} = 0$, em que a barra representa uma média.

Considerando um sistema com características randômicas de n partículas, definimos a média da ação para um sistema estocástico de partículas que se deslocam de a a b como

$$\overline{A}_{ab} = \sum_k p_k A_k, \quad (3.25)$$

em que p_k é a probabilidade de ocorrência da k -ésima trajetória. Fazendo a variação da média, obtemos

$$\begin{aligned} \delta \overline{A}_{ab} &= \sum_k \delta p_k A_k + \sum_k p_k \delta A_k \\ &= \delta Q_{ab} + \overline{\delta A}, \end{aligned} \quad (3.26)$$

em que introduzimos a quantidade

$$\delta Q_{ab} = \delta \overline{A}_{ab} - \overline{\delta A} = \sum_k \delta p_k A_k. \quad (3.27)$$

A grandeza Q_{ab} é chamada de varentropia, uma medida generalizada da incerteza de probabilidade de um sistema, que é definida por meio de uma analogia com um sistema termodinâmico fechado. Para a termodinâmica, sabemos que $\delta E = T \delta S$, sendo E a energia, T a temperatura e S a entropia, e que $\delta E = \sum_i \delta p_i E_i$. Dessa maneira, a varentropia está relacionada com a entropia

⁴ Nesse contexto denotaremos a ação pela letra A , para que não haja confusão com a entropia que será denotada por S posteriormente.

(S_{ab}) por

$$\delta Q_{ab} = \frac{\delta S_{ab}}{\gamma}, \quad (3.28)$$

em que γ é um parâmetro cujo significado físico será discutido no contexto da distribuição de probabilidade de trajetória do movimento browniano. Utilizando a condição $\overline{\delta A} = 0$ e a definição (3.28) na equação (3.26), temos

$$\delta(S_{ab} - \gamma \overline{A}_{ab}) = 0. \quad (3.29)$$

A fim de complementar o princípio da mínima ação estocástico, adicionamos a constante de normalização ($\alpha \sum_k p_k = 1$) como um vínculo do cálculo da variação da ação, o que resulta em

$$\delta(S_{ab} - \gamma \sum_k p_k A_k + \alpha \sum_k p_k) = 0. \quad (3.30)$$

O vínculo da constante de normalização é adicionado devido ao princípio de Jaynes, que nos diz que a distribuição de probabilidades ótima é a que resulta da maximização da entropia de Shannon sob a limitação dos vínculos conhecidos do sistema. Como todo sistema probabilístico obedece ao vínculo $\sum_k p_k = 1$, vínculo de normalização, ele é o mais natural a ser considerado.

3.4 Princípio de Jaynes

A teoria da informação é um importante campo da física e tem como fundador Claude E. Shannon (1948). Em seus estudos, Shannon estabeleceu a conexão entre o conceito de entropia (termodinâmica) e informação (teoria da informação), tal relação possibilitou a aplicação do conceito de entropia em vários sistemas probabilísticos (KESAVAN, 2009). A teoria da informação pode ser enunciada como a maneira de extrair conhecimento de um conjunto parcial de dados, sendo que uma das estratégias para isso é o uso do princípio de Jaynes.

O princípio de Jaynes afirma que a maneira de extrair o máximo de conhecimento, sem fazer afirmações equivocadas, é maximizando a entropia da informação, uma vez que sabemos apenas dados parciais do sistema. Em um sistema com um conjunto de distribuições de probabilidades que satisfazem os vínculos impostos, a distribuição com maior entropia deve ser a escolhida, essa é a maneira de fazer uma estimativa menos tendenciosa possível (JAYNES, 1957).

Uma importante medida nesse contexto é a quantidade de informação gerada pela ocorrência de um evento com probabilidade p_j (SHANNON, 1948), definida por

$$I_j = \ln \left(\frac{1}{p_j} \right), \quad (3.31)$$

podemos perceber que quanto mais rara for a probabilidade de ocorrência deste evento, maior será a quantidade de informação gerada por ele. Tomando o valor esperado da informação de um conjunto de eventos, temos a definição de entropia

$$S = - \sum_i p_i \ln p_i, \quad (3.32)$$

dessa maneira, o princípio de Jaynes nos diz que a melhor distribuição de probabilidade para descrever um sistema é aquela que nos dá o máximo valor esperado de informação considerando os vínculos do sistema.

Nas seções a seguir, o princípio de Jaynes é utilizado para a obtenção das distribuições de probabilidade para a posição de partículas no movimento browniano e para as trajetórias do princípio da mínima ação estocástico. Essencialmente, o que muda de um caso para o outro são os vínculos, o único vínculo que será comum a todos os casos é a normalização das probabilidades ($\sum_i p_i = 1$), denominado vínculo natural (KESAVAN, 2009).

3.4.1 A distribuição de probabilidade de posição do movimento browniano

O movimento browniano é um tipo de movimento randômico, tendo isso em vista, a posição de uma partícula performando tal movimento será descrita por uma distribuição de probabilidade. Para obtermos tal distribuição utilizamos o princípio de Jaynes, apresentado na seção anterior. Consideramos um movimento browniano unidimensional ocorrendo na dimensão denotada por x . Os vínculos que esse movimento deve satisfazer são

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) dx = 1, \quad (3.33)$$

o vínculo natural em sua forma integral, pois as partículas podem ser encontradas em qualquer ponto do eixo x , e a finitude da variância, pois consideramos um processo em que as partículas estão sob a ação de pequenas forças randômicas, fazendo com que elas não performem

deslocamentos muito grandes. Logo, sob essa condição, encontramos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 p(x) dx = \sigma^2, \quad (3.34)$$

note que consideramos a média da distribuição igual a zero.

Devemos agora maximizar a entropia de Shannon (3.32) com a imposição dos vínculos acima. Para isso, utilizaremos o formalismo de Euler-Lagrange para sistemas com vínculos, apresentado na seção 2.1.1. Se desejamos maximizar uma lagrangiana ($\mathcal{L}$) com a imposição dos vínculos $f_i = 0$, devemos redefinir a lagrangiana como $\mathcal{L}' = \mathcal{L} + \sum_i \lambda_i f_i$ e aplicar a equação de Euler-Lagrange. Assim, para o nosso caso, em que desejamos maximizar a entropia $S = -\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \ln p(x) dx$, definimos a lagrangiana como

$$\mathcal{L} = -\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \ln p(x) dx - \lambda_1 \left(\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) dx - 1 \right) - \lambda_2 \left(\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 p(x) dx - \sigma^2 \right). \quad (3.35)$$

Como $\mathcal{L}$ é função apenas de $p(x)$, a equação de Euler-Lagrange (2.8) fica com a forma

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial p} = 0. \quad (3.36)$$

Então, calculando a equação de Euler-Lagrange a partir da lagrangiana (3.35), teremos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial p} &= \frac{\partial}{\partial p} \left[-\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \ln p(x) dx - \lambda_1 \left(\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) dx - 1 \right) - \lambda_2 \left(\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 p(x) dx - \sigma^2 \right) \right] \\ &= -\int_{-\infty}^{+\infty} dx [\ln p(x) + 1 + \lambda_1 + \lambda_2 x^2]. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Como $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial p} = 0$, obtemos

$$\ln p(x) + 1 + \lambda_1 + \lambda_2 x^2 = 0, \quad (3.38)$$

que pode ser reescrita de forma equivalente como

$$p(x) = \exp(-1 - \lambda_1 - \lambda_2 x^2). \quad (3.39)$$

Aplicando (3.39) nas equações de vínculo. Para a equação (3.33), encontramos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-1 - \lambda_1 - \lambda_2 x^2) dx = 1 \rightarrow \exp(1 + \lambda_1) = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda_2}}. \quad (3.40)$$

Para a equação de vínculo (3.34), temos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \exp(-1 - \lambda_1 - \lambda_2 x^2) = \sigma^2. \quad (3.41)$$

Usando a definição mais geral para uma integral gaussiana (Apêndice B),

$$\int_0^{+\infty} x^n e^{-ax^b} dx = \frac{1}{a^{\frac{n+1}{b}} b} \Gamma\left(\frac{n+1}{b}\right), \quad (3.42)$$

encontramos

$$\int_0^{+\infty} x^2 \exp(-\lambda_2 x^2) dx = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda_2^3}} \quad (3.43)$$

em que utilizamos o resultado $\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$. Desta forma, retornando o resultado acima em (3.41) e utilizando a equação (3.40), encontramos

$$\lambda_2 = \frac{1}{2\sigma^2}. \quad (3.44)$$

Por fim, substituindo λ_2 em (3.40), obtemos:

$$\exp(1 + \lambda_1) = \sigma\sqrt{2\pi}. \quad (3.45)$$

Portanto, a partir dos resultados obtidos, expressamos (3.39) como

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right). \quad (3.46)$$

Podemos observar que a distribuição de probabilidade de posição de uma partícula browniana é a distribuição gaussiana com média $\bar{x} = 0$, pois consideramos que o movimento se inicia em $x = 0$, e variância σ^2 .

Uma outra maneira de obter a distribuição de probabilidade de posição de uma partícula browniana é por meio da equação de difusão (EINSTEIN, 1906), sendo ela

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2}, \quad (3.47)$$

em que D é a constante de difusão e t o tempo. A equação de difusão (3.47) é um caso específico da equação de Fokker-Planck

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial(Ap)}{\partial x} - \frac{\partial^2(Dp)}{\partial x^2} = 0, \quad (3.48)$$

em que A é um termo de velocidade relativo às forças externas, sendo que no caso do movimento browniano temos $A = 0$ e D constante (CHAICHIAN; DEMICHEV, 2018). A equação de Fokker-Planck é uma abordagem macroscópica de um processo estocástico.

Ao resolvermos a equação de difusão (3.47) encontramos como resultado a distribuição gaussiana, corroborando o resultado obtido pelo princípio de Jaynes, com variância $\sigma^2 = Dt$. Dessa maneira, temos que a distribuição de probabilidade de posição de uma partícula browniana é

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{2Dt}\right). \quad (3.49)$$

O parâmetro de difusão (D) foi obtido por Einstein como sendo $D = \frac{K_B T}{6\pi r \eta}$, em que K_B é a constante de Boltzman, T a temperatura absoluta, r o raio da partícula e η é a viscosidade do meio (EINSTEIN, 1906). Observe que na equação (3.49) o coeficiente de difusão aparece no denominador de uma exponencial negativa, então quanto maior o coeficiente maior será a probabilidade de difusão. De fato, utilizando apenas argumentos conceituais, vemos que energia térmica ($K_B T$) facilita o processo de difusão, uma vez que ela é uma medida do nível de agitação da partícula, enquanto a dimensão da partícula (r), devido à inércia, e a viscosidade do meio (η), devido à força de arraste, dificultam.

3.4.2 Obtenção da distribuição de probabilidade de trajetória

Depois de formularmos o princípio da mínima ação estocástico o próximo passo consiste em construir a distribuição de probabilidade de trajetória para um movimento randômico. Para isso, utilizaremos o princípio de Jaynes apresentado na seção 3.4 e os vínculos obtidos para o princípio da mínima ação estocástico (3.30). Os vínculos são

$$\sum_i p_i = 1, \quad (3.50)$$

o vínculo natural; e para uma grandeza arbitrária g_{ri} , temos

$$\sum_i p_i g_{ri} = \langle g_r \rangle, \text{ em que } r = 1, 2, \dots, m \quad (3.51)$$

o vínculo do valor esperado. Nesse caso tomamos uma distribuição discreta, uma vez que as trajetórias são distribuídas discretamente. Note que tomamos o valor esperado de uma grandeza genérica (g_{ri}), para evidenciar que a distribuição de probabilidade que satisfaz esses vínculos pode ser utilizada em outros sistemas.

No caso do princípio da mínima ação estocástico o valor esperado é referente à ação, porém o valor esperado é importante em outras situações na física, uma vez que é uma grandeza mensurável experimentalmente em um contexto probabilístico. No caso da mecânica quântica, por exemplo, o valor esperado são os observáveis físicos dos experimentos (COHEN-TANNOUDJI; DIU; LALOË, 1977). No caso da mecânica estatística, a energia do sistema é mensurável e ocupa o lugar de valor esperado nos vínculos; para o contexto do gás de Boltzmann⁵, o vínculo acima é escrito como $E = \sum_i \varepsilon_i N_i$, em que E é a energia total do sistema, ε_i a energia de um dado nível e N_i o número de partículas no i -ésimo nível (SALINAS, 1997).

Empregamos o formalismo de Euler-Lagrange para a maximização da entropia (S) sob a restrição dos vínculos acima citados. Para a maximização de uma lagrangiana $\mathcal{L}'$ com os vínculos $f_i = 0$, reescrevemos a lagrangiana com os vínculos e os multiplicadores de Lagrange (λ_i)

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}' + \sum_i \lambda_i f_i \quad (3.52)$$

e então aplicamos a equação de Euler-Lagrange. A lagrangiana para esse caso tem a forma

$$\mathcal{L} = -\sum_i p_i \ln p_i - \lambda_0 \left(\sum_i p_i - 1 \right) - \sum_r \lambda_r \left(\sum_i p_i g_{ri} - \langle g_r \rangle \right) + \left(\sum_i p_i - 1 \right), \quad (3.53)$$

em que adicionamos o vínculo ($\sum_i p_i - 1$) mais uma vez por conveniência, para que não tenhamos um fator igual a 1 subtraindo no final da aplicação da equação de Euler-Lagrange.

⁵ Um gás em que as moléculas se encontram em níveis de energia discretos.

Assim, ao calcularmos a equação de Euler-Lagrange, obtemos

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial p_j} &= -\frac{\partial}{\partial p_j} \left(\sum_i p_i \ln p_i \right) - (\lambda_0 - 1) \frac{\partial}{\partial p_j} \left(\sum_i p_i - 1 \right) - \sum_r \lambda_r \frac{\partial}{\partial p_j} \left(\sum_i p_i g_{ri} - a_r \right) \\ &= -\ln p_i - \lambda_0 - \sum_r \lambda_r g_{ri},\end{aligned}\quad (3.54)$$

logo,

$$p_i = \exp(-\lambda_0 - \lambda_1 g_{1i} - \dots - \lambda_m g_{mi}). \quad (3.55)$$

Substituindo o resultado p_i nas equações de vínculo (3.50) e (3.51), obtemos

$$\exp(\lambda_0) = \sum_i \exp \left(-\sum_j \lambda_j g_{ji} \right) \quad (3.56)$$

e

$$\langle g_r \rangle = \frac{\sum_i g_{ri} \exp \left(-\sum_j \lambda_j g_{ji} \right)}{\sum_i \exp \left(-\sum_j \lambda_j g_{ji} \right)}. \quad (3.57)$$

Identificamos o termo no denominador de (3.57) como a função de partição do sistema e a denotamos por

$$Z = \sum_i \exp \left(-\sum_j \lambda_j g_{ji} \right). \quad (3.58)$$

Assim, obtemos, por meio do princípio de Jaynes a mesma distribuição de probabilidades utilizada na mecânica estatística, o formalismo de funções de partição. Ao fazermos a identificação da equação acima com (3.51), podemos inferir que

$$p_i = \frac{\exp \left(-\sum_j \lambda_j g_{ji} \right)}{\sum_i \exp \left(-\sum_j \lambda_j g_{ji} \right)}, \quad (3.59)$$

sendo que (3.59) é o modelo de distribuição de probabilidade que utilizaremos para a distribuição de probabilidade de trajetória de um movimento randômico descrito pelo princípio da mínima ação estocástico. É pertinente ressaltar que a distribuição (3.59) é utilizada no contexto da termodinâmica estatística. Para este caso temos $g_{ji} = E_i$, sendo essa a energia do i -ésimo nível do sistema, e $\lambda_j = \frac{1}{K_B T}$ para qualquer j devido ao teorema de equipartição, isso é, $\langle E \rangle \propto K_B T$. O termo K_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura.

3.5 Casos de distribuição de probabilidade de trajetória

Aplicaremos agora a probabilidade (3.59) para um sistema de partículas em regime de movimento randômico, que movimentam-se de uma região A até uma região B a partir de w possíveis trajetórias (LIN, 2013). Esta é a distribuição adequada porque é a distribuição de probabilidade obtida por meio do princípio de Jaynes sob as considerações dos vínculos do princípio da mínima ação estocástico (3.30). Calcularemos a probabilidade para 3 casos: 1) sabendo exatamente o ponto de partida a em A e chegada b em B , 2) sabendo o ponto de partida a em A , mas não sabendo o ponto de chegada em B e 3) não sabendo o ponto de partida em A nem o ponto de chegada em B .

Caso 1

Sabendo exatamente o ponto de partida a em A e chegada b em B , a probabilidade (3.59) tem a forma

$$p_k(a, b) = \frac{1}{Z_{ab}} e^{-\gamma A_k(a, b)}, \quad (3.60)$$

sendo $Z_{ab} = \sum_k^w e^{-\gamma A_k(a, b)}$.

Calculando a entropia de trajetória

$$\begin{aligned} S_{ab} &= - \sum_k^w p_k \ln \left(\frac{1}{Z_{ab}} e^{-\gamma A_k(a, b)} \right) \\ &= \sum_k^w p_k \gamma A_k(a, b) + \sum_k^w p_k \ln Z_{ab} \\ &= \gamma \bar{A}_{ab} + \ln Z_{ab}, \end{aligned} \quad (3.61)$$

em que utilizamos $\bar{A}_{ab} = \sum_k^w p_k A_k(a, b)$. Observe que podemos obter a ação média por meio da relação $\bar{A}_{ab} = -\frac{\partial}{\partial \gamma} \ln Z_{ab}$.

Caso 2

Na situação em que sabemos o ponto de partida a em A , mas não sabendo o ponto de chegada em B , obtemos que a função de partição Z_a deverá ter um somatório nos possíveis pontos b . Desta forma, encontramos

$$p_k(a, B) = \frac{1}{Z_a} e^{-\gamma A_k(a, b)}, \quad (3.62)$$

sendo $Z_a = \sum_{k,b} e^{-\gamma A_k(a,b)}$.

Calculando a entropia de trajetória

$$\begin{aligned} S_{ab} &= - \sum_{k,b}^w p_k \ln \left(\frac{1}{Z_a} e^{-\gamma A_k(a,b)} \right) \\ &= \gamma \bar{A}_a + \ln Z_a, \end{aligned} \quad (3.63)$$

em que $\bar{A}_a = \sum_{k,b} p_k A_k(a,b)$. Observe que podemos também obter a ação média por meio de $\bar{A}_a = -\frac{\partial}{\partial \gamma} \ln Z_a$.

Tomando a média da ação das trajetórias para o caso 2 e a distribuição de probabilidade de trajetórias (3.62), para obtermos uma distribuição de trajetória independente do caminho k , podemos escrever a média da ação da seguinte forma

$$\begin{aligned} \bar{A}_a &= \sum_{k,b} p_k A_k(a,b) \\ &= \frac{1}{Z_a} \sum_b \sum_k \left(e^{-\gamma A_k(a,b)} A_k(a,b) \right). \end{aligned} \quad (3.64)$$

Substituindo a média da ação para o caso 1, $\bar{A}_{ab} = \sum_k^w \frac{1}{Z_{ab}} e^{-\gamma A_k(a,b)} A_k(a,b)$ em (3.64), reescrevemos

$$\begin{aligned} \bar{A}_a &= \sum_b \frac{1}{Z_a} Z_{ab} \bar{A}_{ab} \\ &= \sum_b \frac{1}{Z_a} \exp(\ln Z_{ab}) \bar{A}_{ab}. \end{aligned} \quad (3.65)$$

Agora, utilizando a entropia de trajetória (3.63), obtemos

$$\bar{A}_a = \frac{1}{Z_a} \sum_b \exp(S_{ab} - \gamma \bar{A}_{ab}) \bar{A}_{ab}. \quad (3.66)$$

Encontramos, assim, uma fórmula para a probabilidade de trajetória ($p(a,B)$) de um ponto fixo a em A a um ponto arbitrário b em B independente do caminho k ,

$$p(a,B) = \frac{1}{Z_a} \exp(S_{ab} - \gamma \bar{A}_{ab}). \quad (3.67)$$

Note que, nesse caso, a probabilidade de ocorrência de uma trajetória depende da diferença entre a entropia de trajetória e da média da ação, não somente da ação.

Caso 3

Na situação em que não sabemos o ponto de partida em A nem o ponto de chegada em B , obtemos que a função de partição Z terá um somatório em todas as possíveis trajetórias k , todos os possíveis pontos iniciais a e todos os pontos finais b . Desta forma, encontramos

$$p_k(A, B) = \frac{1}{Z} e^{-\gamma A_k(a, b)}, \quad (3.68)$$

sendo $Z = \sum_{a, b, k} e^{-\gamma A_k(a, b)}$.

Calculando a entropia de trajetória

$$\begin{aligned} S_{ab} &= - \sum_k^w p_k \ln p_k \\ &= \gamma \bar{A} + \ln Z, \end{aligned} \quad (3.69)$$

em que $\sum_k^w p_k A_k(a, b) = \bar{A}$.

Utilizando o mesmo desenvolvimento do caso 2, para obter uma distribuição de trajetória independente do caminho k , podemos escrever

$$\begin{aligned} \bar{A} &= \sum_{a, b, k} p_k A_k(a, b) \\ &= \sum_{a, b, k} \frac{1}{Z} e^{-\gamma A_k(a, b)} A_k(a, b) \\ &= \sum_{a, b} \frac{1}{Z} \exp(S_{ab} - \gamma \bar{A}_{ab}) \bar{A}_{ab}. \end{aligned} \quad (3.70)$$

Assim encontramos uma fórmula para a probabilidade ($p(A, B)$) de um ponto qualquer em A a um ponto arbitrário em B independente do caminho k ,

$$p(A, B) = \frac{1}{Z} \exp(S_{ab} - \gamma \bar{A}_{ab}). \quad (3.71)$$

Definindo $F_{ab} = \bar{A}_{ab} - \frac{S_{ab}}{\gamma}$, que chamamos de ação livre (análogo à energia livre da termodinâmica) (LIN, 2013), podemos escrever a probabilidade como

$$p(A, B) = \frac{1}{Z} \exp(-\gamma F_{ab}). \quad (3.72)$$

A ação livre é a quantidade de ação disponível para que um sistema de partículas passe de um estado A para um estado B , por essa razão, a probabilidade (3.72) depende diretamente dessa quantidade.

Conseguimos observar, por meio das distribuições de probabilidade obtidas para os três casos acima, determinadas a partir do princípio da mínima ação estocástico, que sua formulação é compatível com o princípio da mínima ação clássico. Somos capazes de fazer tal afirmação pois a probabilidade de ocorrência de uma trajetória é inversamente proporcional à ação. Ressaltamos que a constante γ deve ser positiva, uma vez que ela relaciona a entropia de trajetória com a incerteza de escolha dessa trajetória e essa relação deve ser de proporcionalidade. Podemos também observar que esse formalismo possibilita a obtenção de grandezas que caracterizam o sistema como a ação média e a ação livre, em analogia ao desenvolvimento conhecido na termodinâmica estatística.

No próximo capítulo construiremos o formalismo de integrais de trajetória para o movimento browniano, uma outra abordagem para obtermos a probabilidade de ocorrência de trajetórias. É esperado, portanto, que o formalismo de integrais de trajetória e o princípio da mínima ação sejam compatíveis. Além disso, verificaremos a relação exponencial entre a probabilidade de trajetória e a ação por meio de uma simulação computacional.

4 INTEGRAIS DE TRAJETÓRIA

Neste capítulo faremos a apresentação do formalismo de integrais de trajetória no contexto de processos estocásticos. Tal formalismo nos permite obter a probabilidade de ocorrência das trajetórias de um sistema, bem como a probabilidade de transição de um estado a outro. Apresentaremos a integral de trajetória pelo formalismo de Wiener, a formulação de integrais de trajetória para o movimento browniano. Com posse desse formalismo estudaremos o movimento randômico com ruído gaussiano em uma aproximação discreta, que será desenvolvido para um caso em que a solução analítica da integral de trajetória é viável e em outros dois casos em que essa solução não é viável; para os casos em que a solução analítica não é viável, desenvolveremos simulações computacionais. Por meio dessa solução analítica e das simulações verificaremos a correlação entre a probabilidade de ocorrência da trajetória e a ação da mesma, dessa maneira podemos testar a compatibilidade entre o princípio da mínima ação estocástico e o formalismo de integrais de trajetória.

4.1 Uma breve introdução sobre as integrais de trajetória

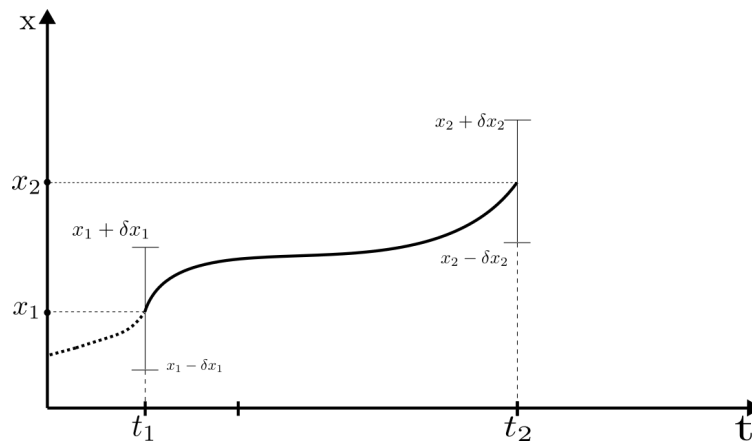
A primeira formulação para as integrais de trajetória foi obtida no contexto do movimento browniano por Wiener em busca de uma solução para esse problema em 1921, e por isso também ficou conhecida como integral de Wiener (WIENER, 1921). Posteriormente, Feynman formula as integrais de trajetória para o contexto da mecânica quântica, sob inspiração dos avanços de Dirac na utilização do princípio da mínima ação na mecânica quântica, obtendo uma solução para a equação de Schrödinger na forma da, hoje conhecida, integral de Feynman (FEYNMAN et al., 1948).

Após esse período inicial de formulações até os dias atuais, uma infinidade de aplicações foram encontradas para as integrais de trajetória em inúmeros ramos da física. Podemos citar a teoria quântica de campos (formulação funcional, campos de Yang-Mills, teoria gravitacional, etc), o movimento browniano em um meio absorvente, a física estatística (supercondutividade, superfluidos, transições de fase), a mecânica quântica não relativística, a física de polímeros e outras áreas (CHAICHIAN; DEMICHEV, 2018). Para além da física, há aplicações em sistemas estocásticos diversos, como na modelagem de mercado financeiro (KLEINERT, 2009) e em tópicos de biologia, conhecidos como QIB (*Quantum-Inspired Biology*), como a teoria da evolução (PEASE, 2011).

4.2 Integral de trajetória pelo formalismo de Wiener

Para apresentar a integral de trajetória de Wiener tomamos uma partícula em movimento unidimensional em um regime não-determinístico, ou seja, não podemos aplicar os formalismos da mecânica clássica que apresentamos no capítulo 2. Consideremos que essa partícula parte de um ponto conhecido x_1 e queremos saber a probabilidade que ela passe em um ponto x_2 entre os valores $x_2 - \delta x_2$ e $x_2 + \delta x_2$. Veja a figura 4.1.

Figura 4.1 – Representação gráfica de uma partícula se movendo do ponto x_1 até um possível ponto x_2 no eixo x .



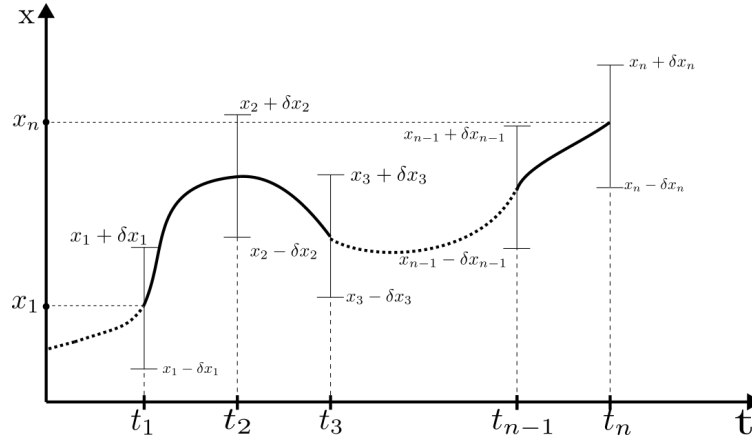
Fonte: autor

Considerando que a distribuição de probabilidade $p(x)$ que descreve esse movimento seja conhecida, temos que a probabilidade dessa partícula apresentar uma trajetória que passe pelo ponto x_2 com a tolerância estipulada é dada por

$$P(x_2) = \int_{x_2 - \delta x_2}^{x_2 + \delta x_2} dx_2 p(x_2). \quad (4.1)$$

Imaginemos agora que impomos que a trajetória da partícula seja dividida em n partes (passos), ou seja, ela passe por x_n pontos que também estão dados como $x_n - \delta x_n \leq x_n \leq x_n + \delta x_n$. Veja a figura 4.2.

Figura 4.2 – Representação gráfica de uma partícula se movendo do ponto x_1 até um possível ponto x_n no eixo x por meio de n passos.



Fonte: autor

Esses x_n pontos são igualmente espaçados por $\varepsilon = \delta x_n$ e o tempo necessário para mover-se de um ponto x_i até x_{i+1} é igual, isso significa dizer que $x(t_i) = x_i$. Utilizando a propriedade de Markov, que nos diz que cada passo de um processo estocástico é independente do anterior (CHAICHIAN; DEMICHEV, 2018), podemos escrever a probabilidade de ocorrência de uma trajetória k , que passa pelos pontos x_n , como

$$\begin{aligned}
 P_k &= \int_{x_1 - \delta x_1}^{x_1 + \delta x_1} p(x_1) dx_1 \int_{x_2 - \delta x_2}^{x_2 + \delta x_2} p(x_2 - x_1) dx_2 \dots \int_{x_n - \delta x_n}^{x_n + \delta x_n} p(x_n - x_{n-1}) dx_n \\
 &= \prod_{i=1}^n \int_{x_i - \delta x_i}^{x_i + \delta x_i} p(x_i - x_{i-1}) dx_i.
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

A equação (4.2) é a integral de trajetória para um processo estocástico em que a dependência do parâmetro t_i em x_i é discreta (MAZO, 2002), ou seja, para um processo estocástico discreto.

É interessante, nesse ponto, explorar brevemente a definição de processos markovianos ou cadeias de Markov, uma vez que a formulação da integral de trajetória apresentada considera esse tipo de processo. Podemos definir uma cadeia de Markov como um processo estocástico de um sistema que tem estados discretos $E_1, E_2, \dots, E_n$, no qual a probabilidade de estar em um estado $E_i(t_j)$ depende apenas do estado anterior $E_i(t_{j-1})$. Nesse sistema, o tempo t_j é utilizado como parâmetro. Dizemos que um sistema não apresenta memória se a probabilidade de transição de um estado para o outro depende apenas do estado imediatamente anterior, não dos estados prévios (CHAICHIAN; DEMICHEV, 2018).

Em contrapartida, um processo não-markoviano é um processo em que os estados anteriores do sistema influenciam os estados futuros, não apenas o estado imediatamente anterior.

No presente trabalho iremos nos ater ao estudo de processos markovianos; um tratamento para processos não-markovianos pode ser encontrado na referência (LIMA, 2013).

Em analogia com a integral do valor esperado de uma grandeza qualquer a , com probabilidade de ocorrência $p(a)$,

$$\langle a \rangle = \int a p(a) da, \quad (4.3)$$

podemos obter o valor esperado de um funcional $F[x_n(t)]$ por meio de

$$\langle F[x_n(t)] \rangle = \prod_{i=1}^n \int_{x_i - \delta x_i}^{x_i + \delta x_i} F[x_i(t)] p(x_i) dx_i, \quad (4.4)$$

sendo que a equação (4.4) também pode ser nomeada como integral de trajetória ou integral funcional.

Discutiremos agora o caso em que temos uma forma específica para a distribuição de probabilidade $p(x_i)$ para demonstrar como passamos da dependência discreta de um parâmetro para uma dependência contínua, nesse caso nosso parâmetro é t . Tomamos a distribuição de probabilidade

$$p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{2Dt}}, \quad (4.5)$$

pois esta distribuição de probabilidade corresponde ao resultado obtido para o movimento browniano na seção 3.4.

Fazendo uso da distribuição (4.5), podemos reescrever a equação (4.4) como

$$\langle F_n \rangle = \left(\frac{1}{2\pi D} \right)^{\frac{n}{2}} \prod_{j=0}^n \left(\frac{1}{(t_j - t_{j-1})} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x_1^2}{2Dt_1}} e^{-\frac{(x_2 - x_1)^2}{2D(t_2 - t_1)}} \dots e^{-\frac{(x_n - x_{n-1})^2}{2D(t_n - t_{n-1})}} F(x_1, x_2, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n. \quad (4.6)$$

A integral de trajetória, em que a distribuição de probabilidade de cada ponto é gaussiana, é conhecida como integral de trajetória de Wiener. O processo estocástico que obedece essa equação é chamado de Processo de Wiener (CHAICHIAN; DEMICHEV, 2018). Outros modelos de integrais de trajetória podem ser construídos ao mudarmos a distribuição de probabilidade que aparece na integral de trajetória (4.4).

De posse de $\langle F_n \rangle$, fazemos crescer o número de pontos em que $x(t)$ depende de t , a fim de que t se torne um parâmetro contínuo para x . Assim, fazemos $t_j = \frac{j}{n}$ e definimos $\varepsilon = \frac{1}{n}$, logo

$$(t_j - t_{j-1})^{-1} = \left(\frac{j}{n} - \frac{j-1}{n} \right)^{-1} = \left(\frac{j}{n} - \frac{j}{n} + \frac{1}{n} \right)^{-1} = \frac{1}{\varepsilon}, \quad (4.7)$$

resultando em

$$\langle F_n \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{2\pi D\epsilon} \right)^{\frac{n}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\sum_j (x_j - x_{j-1})^2 / 2D\epsilon} F(x_1, x_2 \dots x_n) dx_1 \dots dx_n. \quad (4.8)$$

Para, por fim, chegarmos no limite contínuo podemos fazer a seguinte manipulação

$$\sum_j \frac{(x_j - x_{j-1})^2}{2D\epsilon} = \frac{1}{2D} \sum \left(\frac{\Delta x}{\Delta t} \right)^2 \Delta t = \frac{1}{2D} \int_0^T \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 dt. \quad (4.9)$$

Assim, a integral de trajetória com parâmetros contínuos pode ser escrita na forma compacta

$$\langle F \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2D} \int_0^T \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 dt} F[x(t)] \mathcal{D}x(t), \quad (4.10)$$

em que denotamos $\mathcal{D}x(t) = dx_1 \dots dx_n \left(\frac{1}{2\pi D\epsilon} \right)^{\frac{n}{2}}$, o “elemento de volume” da integral de trajetória, também conhecido como medida.

Em geral, a solução de integrais de trajetória é um procedimento bastante complexo, uma das estratégias mais utilizadas é o processo inverso do que acabamos de apresentar: tomar uma aproximação discreta do tempo e/ou da posição, efetuar o cálculo e então retornar ao problema original ao tomar o limite de $n \rightarrow \infty$. Tal procedimento é de grande importância no contexto da mecânica quântica e também possibilita uma abordagem para a solução computacional (CHAICHIAN; DEMICHEV, 2018).

4.3 O movimento randômico discreto com ruído gaussiano

Apresentaremos agora o movimento randômico discreto para analisarmos o cálculo das integrais de Wiener e o princípio da mínima ação estocástico. Resolveremos analiticamente a integral de trajetória para o caso em que as partículas estão sujeitas a um potencial conservativo. Para outros dois casos, partículas livres e sujeitas a uma força restaurativa quadrática, desenvolveremos simulações computacionais. Verificaremos que há uma relação entre a probabilidade de trajetória e a ação clássica.

Tomamos um movimento que consiste em um conjunto de partículas realizando um movimento aleatório no eixo x , do ponto a (x_0) ao ponto b (x_n) em n intervalos de tempo iguais ($dt = t_i - t_{i-1}$). Para descrevê-lo, utilizamos uma abordagem microscópica, em que definimos uma trajetória clássica e flutuações aleatórias ao redor da mesma. Para essa abordagem temos a

equação de Langevin (CHAICHIAN; DEMICHEV, 2018)

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{dV(x)}{dx} - m\zeta \frac{dx}{dt} - R, \quad (4.11)$$

em que R é a força randômica que gera a aleatoriedade ao redor da trajetória clássica, m a massa da partícula que descreve a trajetória aleatória e $V(x)$ o potencial sob o qual ela está sujeita. Naturalmente, a trajetória clássica é obtida pela solução da segunda lei de Newton

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{dV(x)}{dx}. \quad (4.12)$$

No modelo em questão assumimos o coeficiente de atrito como zero ($\zeta \rightarrow 0$), dessa forma temos um regime conservativo. Isso significa dizer que, nesta aproximação, o sistema é regido pelas forças restaurativas e a dissipação pode ser desconsiderada, um movimento randômico ideal. O movimento browniano é tratado, usualmente, em contextos dissipativos amortecidos ou superamortecidos (CHAICHIAN; DEMICHEV, 2018).

Portanto, obtemos como equação para a trajetória da partícula

$$x_i = x_{i-1} + \chi_i + f(t_i) - f(t_{i-1}), \quad (4.13)$$

em que $f(t)$ é a trajetória clássica obtida pela solução de (4.12), enquanto χ_i é o ruído gerado pela força randômica R . Tomamos o ruído como uma distribuição gaussiana

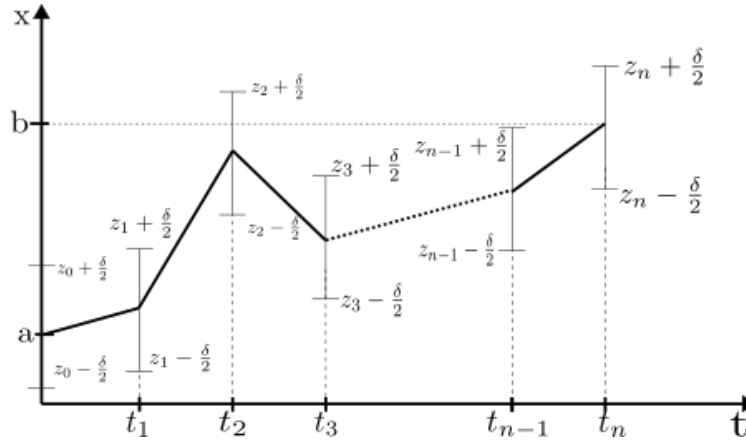
$$p(\chi_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{\chi_i^2}{2\sigma^2}}. \quad (4.14)$$

Desejamos encontrar a probabilidade de que uma trajetória k , composta por n passos, seja realizada. Utilizando a equação (4.2) podemos escrever

$$P_k = \prod_{i=1}^n \int_{z_i-\delta/2}^{z_i+\delta/2} p(\chi_i) dx_i = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \prod_{i=1}^n \int_{z_i-\delta/2}^{z_i+\delta/2} e^{-\frac{\chi_i^2}{2\sigma^2}} dx_i. \quad (4.15)$$

Os limites de integração são os valores limite de cada passo, definidos por $z_i - \delta/2 < x_i < z_i + \delta/2$, ou seja, depois de um passo i a partícula pode estar entre esses dois valores¹. Veja a figura 4.3.

Figura 4.3 – Representação gráfica de uma partícula se movendo do ponto a até o ponto b no eixo x através de n passos.



Fonte: autor

4.3.1 Uma solução analítica para a integral de Wiener

Vamos calcular analiticamente a probabilidade de trajetória do modelo de Wiener (4.15) para um potencial linear. Para casos mais complexos não é possível realizar esse cálculo de maneira analítica.

Primeiramente, vamos reescrever (4.15) com o auxílio de (4.13), assim temos

$$\begin{aligned}
 P_k &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \prod_{i=1}^n \int_{z_i - \delta/2}^{z_i + \delta/2} \exp \left\{ -\frac{[x_i - x_{i-1} - f(t_i) + f(t_{i-1})]^2}{2\sigma^2} \right\} dx_i \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \prod_{i=1}^n \int_{z_i - \delta/2}^{z_i + \delta/2} \exp \left\{ \frac{-[x_i - x_{i-1}]^2 + 2[x_i - x_{i-1}][f(t_i) - f(t_{i-1})] - [f(t_i) - f(t_{i-1})]^2}{2\sigma^2} \right\} dx_i,
 \end{aligned}
 \tag{4.16}$$

¹ Utilizamos z_i apenas para diferenciar os limites de integração da coordenada de posição da partícula. Fazemos isso pois na seção seguinte ficará mais fácil visualizar o tratamento do problema aproximando as trajetórias como pequenos tubos de eixo z_i .

ou ainda, separando os termos

$$P_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{z_i-\delta/2}^{z_i+\delta/2} \exp \left\{ \overbrace{\sum_{i=1}^n \frac{-(x_i - x_{i-1})^2}{2\sigma^2}}^{(i)} + \overbrace{\sum_{i=1}^n \frac{[x_i - x_{i-1}][f(t_i) - f(t_{i-1})]}{\sigma^2}}^{(ii)} - \overbrace{\sum_{i=1}^n \frac{[f(t_i) - f(t_{i-1})]^2}{2\sigma^2}}^{(iii)} \right\} dx_i \quad (4.17)$$

Uma vez que os intervalos temporais são todos do mesmo tamanho, o último termo (iii) é constante

$$\exp \left\{ - \sum_{i=1}^n \frac{[f(t_i) - f(t_{i-1})]^2}{2\sigma^2} \right\} = \text{cte.} \quad (4.18)$$

Considerando que o potencial é $V(x) = mgx_i$, uma vez que o potencial gravitacional é um exemplo recorrente de potencial linear muito utilizado na mecânica, temos que a trajetória clássica é $f(t_i) = -\frac{1}{2}gt_i^2$, em que $t_i = idt$ e g a aceleração da gravidade. Desta forma, o segundo termo (ii) pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} \exp \left\{ \sum_{i=1}^n \frac{[x_i - x_{i-1}][f(t_i) - f(t_{i-1})]}{\sigma^2} \right\} &= \exp \left\{ \sum_{i=1}^n \frac{[x_i - x_{i-1}][-\frac{1}{2}gi^2dt^2 + \frac{1}{2}g(i-1)^2dt^2]}{\sigma^2} \right\} \\ &= \exp \left\{ -\frac{gdt^2}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n \left(i[x_i - x_{i-1}] - \frac{1}{2}[x_i - x_{i-1}] \right) \right\} \\ &= \exp \left\{ \frac{gdt^2}{\sigma^2} \left[\sum_{i=1}^n x_i - \left(n + \frac{1}{2} \right) x_n + \frac{1}{2}x_0 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Como vimos na seção 3.4.1, o desvio padrão para o movimento browniano é $\sigma = \sqrt{2Ddt}$, fazendo a substituição desse valor na equação (4.19), encontramos

$$\begin{aligned} \exp \left\{ \frac{gdt^2}{\sigma^2} \left[\sum_{i=1}^n x_i - \left(n + \frac{1}{2} \right) x_n + \frac{1}{2}x_0 \right] \right\} &= \exp \left\{ \frac{gdt}{2D} \left[\sum_{i=1}^n x_i - \left(n + \frac{1}{2} \right) x_n + \frac{1}{2}x_0 \right] \right\} \\ &= \exp \left\{ \gamma \left[\sum_{i=1}^n mgx_i dt \right] \right\} \exp \left\{ -\frac{gdt}{2D} \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) x_n - \frac{1}{2}x_0 \right] \right\}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

em que $\gamma = \frac{1}{2mD}$. Observe que a segunda exponencial é uma constante.

Agora vamos trabalhar com o primeiro termo (i) da equação (4.17).

$$\exp \left\{ \sum_{i=1}^n \frac{[x_i - x_{i-1}]^2}{2\sigma^2} \right\} = \exp \left\{ -\frac{1}{2} m \gamma \sum_{i=1}^n \frac{[x_i - x_{i-1}]^2}{dt} \right\}. \quad (4.21)$$

Portanto, fazendo uso dos resultados (4.21), (4.20) e (4.18), podemos escrever a equação (4.17) como

$$P_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} N_1 \int_{z_i - \delta/2}^{z_i + \delta/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} m \gamma \sum_{i=1}^n \frac{[x_i - x_{i-1}]^2}{dt} \right\} \exp \left\{ \gamma \left[\sum_{i=1}^n m g x_i dt \right] \right\} dx_i, \quad (4.22)$$

em que a constante N_1 agrupa os termos constantes, ou seja,

$$N_1 = \exp \left\{ -\frac{gdt}{2D} \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) x_n - \frac{1}{2} x_0 \right] - \sum_{i=1}^n \frac{[f(t_i) - f(t_{i-1})]^2}{4Ddt} \right\}. \quad (4.23)$$

Reorganizando os termos de (4.22), escrevemos

$$P_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} N_1 \int_{z_i - \delta/2}^{z_i + \delta/2} \exp \left\{ -\gamma \left[\sum_{i=1}^n \frac{1}{2} m \frac{[x_i - x_{i-1}]^2}{dt} - \sum_{i=1}^n m g x_i dt \right] \right\} dx_i; \quad (4.24)$$

Ao identificarmos a ação da trajetória k como $A_k = \left[\sum_{i=1}^n \frac{1}{2} m \frac{[x_i - x_{i-1}]^2}{(dt)^2} - \sum_{i=1}^n m g x_i \right] dt$,

$$P_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} N_1 \int_{z_i - \delta/2}^{z_i + \delta/2} \exp \{ -\gamma A_k \} dx_i. \quad (4.25)$$

Por fim, fazendo a aproximação de que $x_i \approx z_i$, encontramos o seguinte resultado

$$P_k \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} N_1 \delta \exp \{ -\gamma A_k [z_0, z_1, z_2, \dots, z_n] \}. \quad (4.26)$$

Obtemos uma expressão que está em concordância com o princípio da mínima ação estocástico, quanto menor a ação (A_k) associada a uma trajetória (k), maior será a probabilidade de sua ocorrência.

4.3.2 Simulação computacional

Calculamos agora a probabilidade de trajetória por meio de simulação computacional para partículas livres, partículas sob a influência de uma força constante e partículas sob a influência de uma força restaurativa. Este último tipo de potencial já impossibilita a resolu-

ção analítica da probabilidade, fazendo-se necessário o uso de simulações computacionais que elaboramos na linguagem Python. Para cada simulação criamos 10^3 trajetórias aleatórias e lançamos 10^6 partículas (N) cem vezes, considerando o número de passos (n) igual a 10. Fixamos o ponto de partida (a) e de chegada (b) das partículas, para obter resultados compatíveis com o tratamento realizado na seção 3.5

$$p_k(a, b) = \frac{1}{Z_{ab}} e^{-\gamma A_k(a, b)}. \quad (4.27)$$

Definimos a trajetória como um pequeno tubo de largura δ que tem um eixo de dimensão z_i em cada passo. A largura está relacionada com a quantidade de partículas que poderão passar por essa trajetória. Se δ for muito pequeno, a probabilidade das partículas passarem será muito baixa; por sua vez, se δ for muito grande, os valores de energia e, por consequência, de velocidade e ação, não apresentarão nenhuma influência na probabilidade de passar por essa trajetória. Sabendo disso, elegemos $\delta = \sigma$, uma vez que o desvio padrão está associado à dispersão do deslocamento gaussiano. Considerando também a aproximação de que todas as partículas que passam por dentro de uma mesma trajetória possuem o mesmo valor de ação dado por

$$A = \sum_{i=1}^{10} \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{z_i - z_{i-1}}{t_i - t_{i-1}} \right)^2 - V(x_i) \right] dt. \quad (4.28)$$

Definimos os parâmetros $r = 0.5 \mu m$, $m = 1,38 \times 10^{-15} kg$, $dt = 10^{-5}$ e $\sigma = \sqrt{2Ddt} = 3 \times 10^{-9} m$. O valor do desvio padrão é obtido tomando $T = 300K$, $\eta = 8,5 \times 10^{-4} Pa.s$, com os quais podemos calcular o valor da constante de difusão $D = 4,3 \times 10^{-13} m^2/s$. Tais definições de parâmetros são referentes a uma simulação realística de partículas de sílica (SiO_2) dispersas em água (LIN, 2013).

Partículas livres

O primeiro estudado é o de partículas livres, portanto o potencial ao qual elas estão sujeitas é nulo

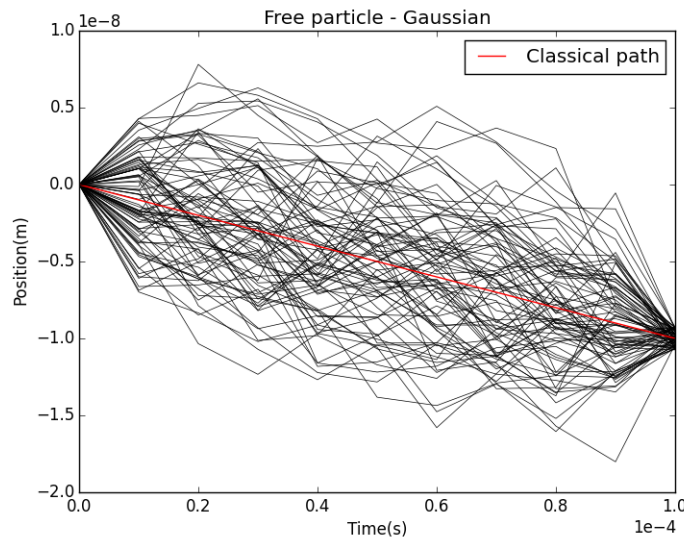
$$V(x) = 0. \quad (4.29)$$

Consideramos que a partícula, na trajetória clássica, possui uma velocidade constante de $10^{-4} m/s$, assim

$$f(t) = -10^{-4} t. \quad (4.30)$$

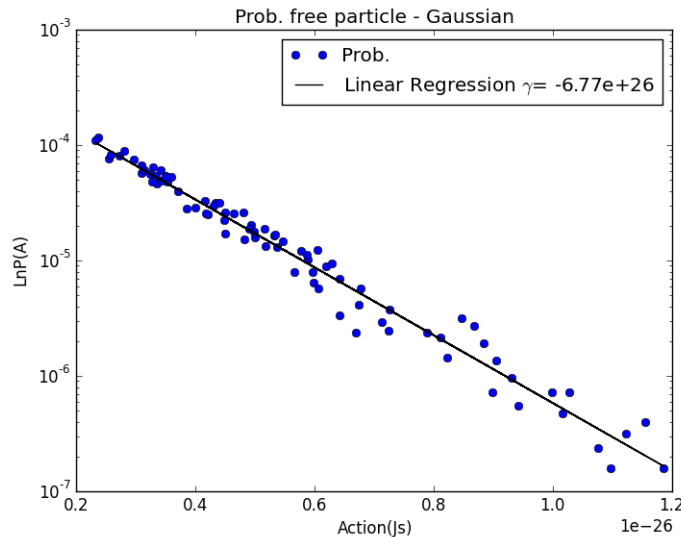
O ponto inicial considerado nesta descrição é $a = 0m$ e o ponto final $b = -1 \times 10^{-8}m$. As possíveis trajetórias que as partículas podem descrever são apresentadas na figura (4.4). A distribuição de probabilidades das trajetórias em função da ação se encontra na imagem (4.5). A reta obtida no gráfico de probabilidades é o fit para a distribuição e possui coeficiente angular de $\gamma = -6.77 \times 10^{26}$. A correlação linear da ação com o logaritmo da probabilidade de trajetória é de $c = 0.987$ em uma escala de 0 a 1, sendo 0 nenhuma correlação e 1 uma correlação perfeitamente linear (DEVORE, 2011).

Figura 4.4 – Possíveis trajetórias descritas pelas partículas para o caso do potencial nulo.



Fonte: autor

Figura 4.5 – Distribuição de probabilidade de trajetória em função da ação para o potencial nulo. A linha representa o fit da distribuição.



Fonte: autor

Partículas sujeitas a uma força constante

O segundo caso que tratamos é o de partículas sujeitas a uma força constante, logo temos como potencial

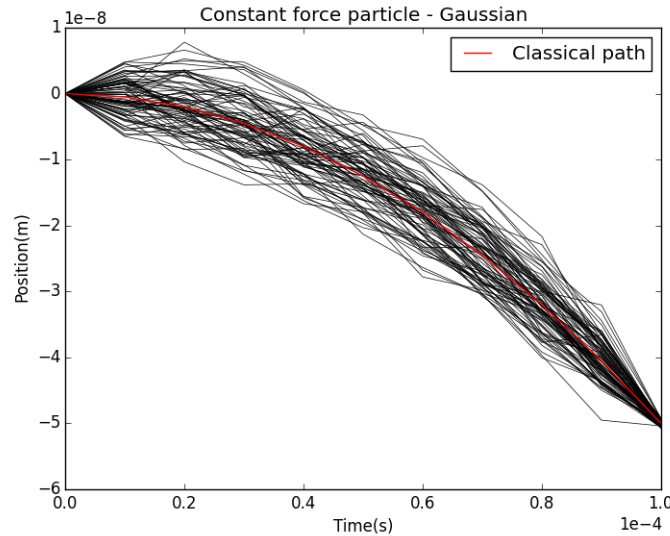
$$V(x) = mgx, \quad (4.31)$$

sendo $g = 10m/s^2$, a aceleração gravitacional. Consideramos que as partículas partem do repouso. Assim, a trajetória clássica é

$$f(t) = \frac{-gt^2}{2}. \quad (4.32)$$

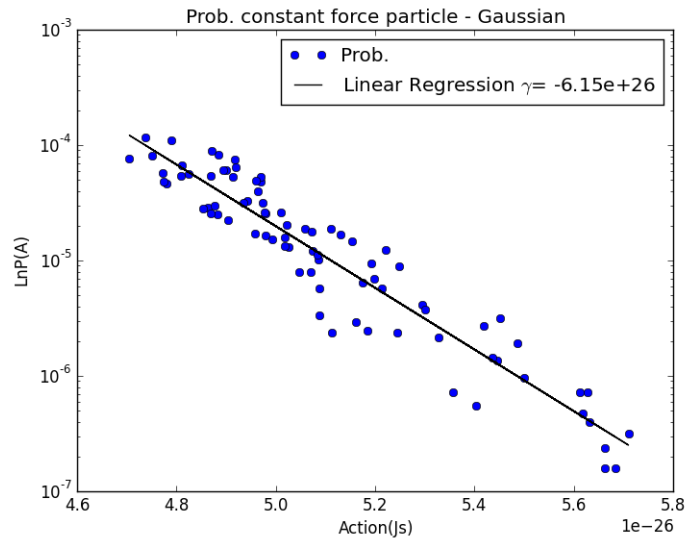
O ponto inicial é $a = 0m$ e o final $b = -5 \times 10^{-8}m$. As possíveis trajetórias que podem ser percorridas estão apresentadas na figura (4.6). As probabilidades de trajetória em função da ação estão representadas na figura (4.7), sendo o fit uma reta com coeficiente angular $\gamma = -6.15 \times 10^{26}$. O coeficiente de correlação é $c = 0.948$

Figura 4.6 – Possíveis trajetórias descritas pelas partículas para o caso do potencial linear.



Fonte: autor

Figura 4.7 – Distribuição de probabilidade de trajetória em função da ação para o caso do potencial linear. A linha representa o fit da distribuição.



Fonte: autor

Partículas sujeitas a uma força restaurativa

O terceiro caso que tratamos é o de partículas sujeitas a uma força restaurativa, portanto o potencial ao qual elas estão sujeitas é

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2. \quad (4.33)$$

Consideramos que a partícula, na trajetória clássica, oscila com uma amplitude $A = 1.5 \times 10^{-8}m$ e frequência $\omega = 6.2 \times 10^4$. Utilizando a relação de dispersão $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$, podemos obter a constante elástica k . A trajetória clássica do oscilador é dada por

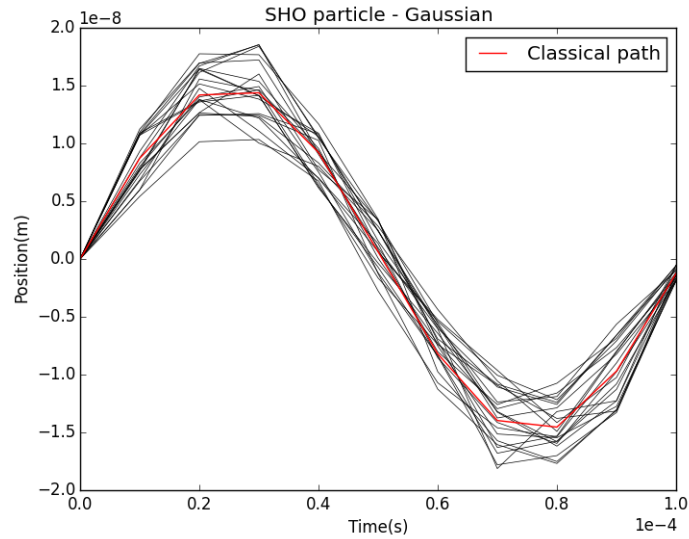
$$f(t) = A \sin(\omega t). \quad (4.34)$$

Para o caso do oscilador harmônico é necessário um cuidado especial. Como a ação é proporcional ao quadrado da amplitude do oscilador, se possibilitamos que as trajetórias randômicas se distanciem muito da trajetória clássica, elas podem acabar se tornando trajetórias de osciladores com outras amplitudes, gerando assim incoerência no resultado das probabilidades de trajetória. Por essa razão podemos tomar duas medidas possíveis:

i) A primeira delas é limitar a distância máxima que as trajetórias randômicas podem atingir. Elegemos que elas devem estar a uma distância máxima de 1,5 vezes o desvio padrão.

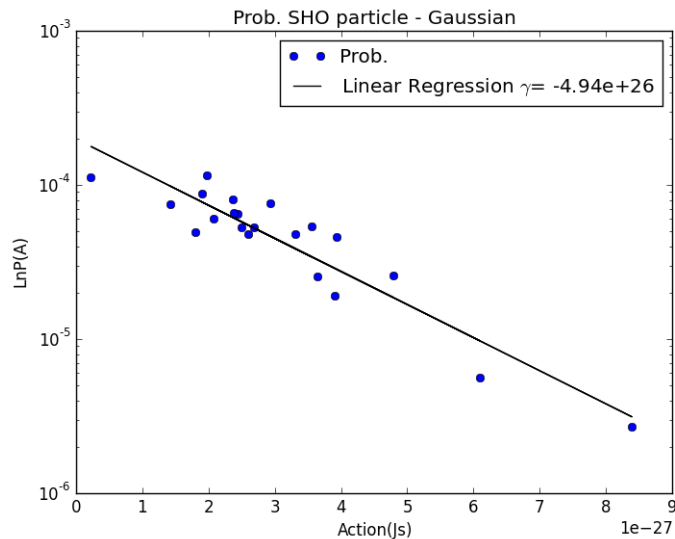
Dessa maneira, obtemos como resultado as trajetórias da figura (4.8) com a distribuição de probabilidade da figura (4.9) e fit com $\gamma = -4.94 \times 10^{26}$. Temos o coeficiente de correlação $c = 0.931$.

Figura 4.8 – Possíveis trajetórias descritas pelas partículas para o caso do potencial quadrático com restrição na distância.



Fonte: autor

Figura 4.9 – Distribuição de probabilidade de trajetória em função da ação para o potencial quadrático com restrição na distância. A linha representa o fit da distribuição.

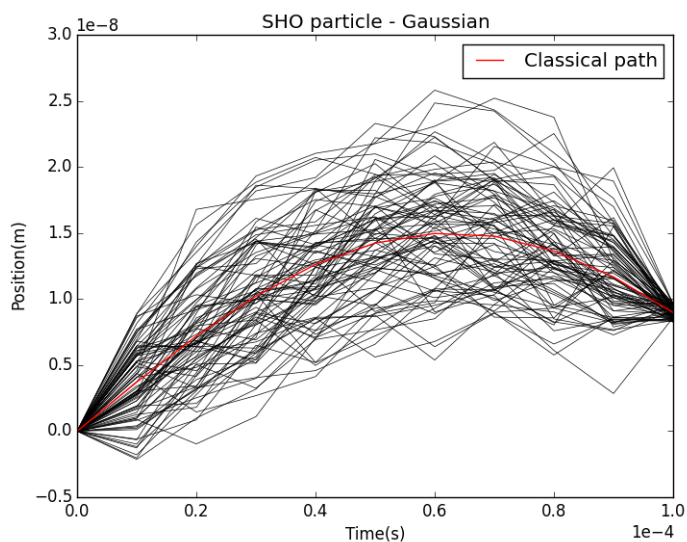


Fonte: autor

ii) Uma segunda opção é diminuir a frequência do oscilador harmônico, garantindo que as trajetórias ocorram ao redor da trajetória clássica. Reduzindo a frequência para $\omega = 2.5 \times$

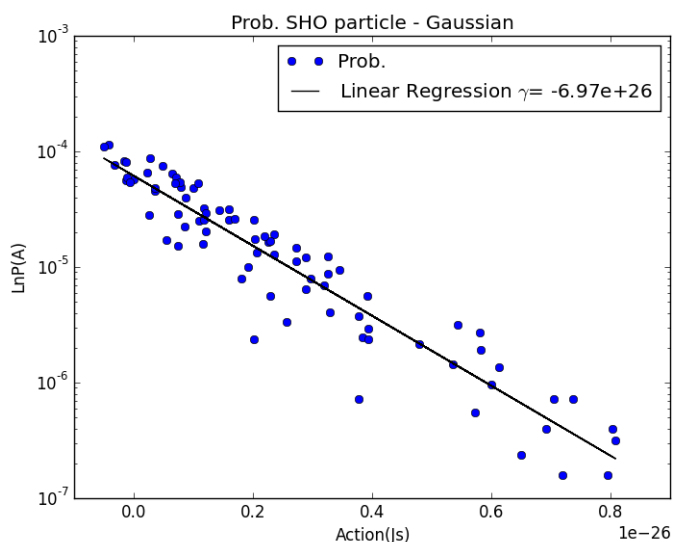
10^4 , temos as trajetórias apresentadas na figura (4.10) com a distribuição de probabilidade da figura (4.11). O coeficiente angular é de $\gamma = -6.96 \times 10^{26}$ e o coeficiente de correlação $c = 0.947$.

Figura 4.10 – Possíveis trajetórias descritas pelas partículas para o caso do potencial quadrático com restrição na distância.



Fonte: autor

Figura 4.11 – Distribuição de probabilidade de trajetória em função da ação para o potencial quadrático com restrição na distância. A linha representa o fit da distribuição.



Fonte: autor

Análise

Podemos observar, a partir dos gráficos de probabilidade de trajetória em função da ação, que existe uma relação de dependência linear entre o logaritmo da probabilidade de ocorrência de uma trajetória com a ação. Dessa forma podemos concluir que há uma relação exponencial entre a ocorrência de uma trajetória e a ação da mesma, corroborando o modelo elaborado para o princípio da mínima ação estocástico. Também podemos perceber que o formalismo de integrais de trajetória de Wiener para o movimento browniano e o formalismo de integrais de trajetória de Feynman para a mecânica quântica apresentam a mesma relação de dependência exponencial em função da ação.

O parâmetro γ que aparece no exponencial da probabilidade de trajetória é o coeficiente angular da reta dos gráficos de probabilidade de trajetória. Tal parâmetro pode ser compreendido como a sensibilidade da probabilidade de trajetória em relação à ação. Podemos calcular o valor de γ utilizando o caso das partículas livres e o formalismo de integrais de trajetória, como apresentado na seção 4.3.1, encontrando $\gamma = \frac{1}{2Dm} = 8,36 \times 10^{26} J^{-1} s^{-1}$, um valor próximo aos resultados encontrados por meio das simulações. Desta maneira, podemos concluir que $\gamma \propto \frac{1}{D}$, assim como no formalismo termodinâmico $\gamma \propto \frac{1}{T}$; do mesmo modo que o aumento de T causa o crescimento da energia dos estados dos sistemas termodinâmicos, o aumento de D aumenta os valores da ação das trajetórias.

É importante ressaltar, todavia, que essa relação entre probabilidade de trajetória e ação é válida para sistemas em que os ruídos que causam a randomicidade são distribuídos gaussianamente. Visto essa condição para a validade do princípio da mínima ação estocástico, a proposta de conclusão desse trabalho é a análise da validade desse princípio para casos em que os ruídos são não gaussianos, discutiremos este cenário em mais detalhes no capítulo 5.

5 CONSIDERAÇÕES SOBRE EVENTOS TIPO CISNE NEGRO

Eventos tipo cisne negro receberam esse nome pelo matemático Taleb, que introduz tal conceito utilizando uma pequena história sobre estes animais. Conta-se que, durante muito tempo todos os cisnes conhecidos pelos europeus eram brancos e por meio dessas observações inferiu-se que todos os cisnes que existiam eram desta cor. Somente em 1697, com a chegada dos europeus à Oceania, foi observada a existência de cisnes negros, assim associa-se a ideia de um evento raro aos cisnes negros. Taleb afirma que, muitas vezes podemos inferir conclusões erradas somente porque a existência de algo é rara. Além disso, ele aponta que ao elaborarmos teorias nos apegamos a elas de modo que ignoramos os eventos que estão fora de suas previsões. Portanto, aos eventos que estão fora das previsões de “normalidade” e que são extremamente críticos Taleb deu o nome de eventos tipo cisne negro (TALEB, 2007).

Podemos citar como exemplos de eventos tipo cisne negro fenômenos em diversas áreas. Taleb, inicialmente, aponta este tipo de evento na dinâmica de mercados financeiros (WEATHERALL, 2013; TALEB, 2007), porém podemos encontrar aplicações desde a biologia no contexto da dinâmica populacional (ANDERSON et al., 2017), até o estudo da ocorrência de terremotos e tsunamis (HOUGH, 2009; NEWS, 2021; WARD; DAY, 2001), bem como também podemos encontrar aplicações no contexto da física de altas energias (KLEINERT, 2014) e em eventos astronômicos (KIPPING, 2021; MUTHUKRISHNA; LOCHNER; WEBB, 2019). No contexto deste trabalho, buscamos a descrição de eventos tipo cisne negro em processos estocásticos.

Para construir um modelo em que eventos desse tipo sejam observados, primeiramente, precisamos olhar para o modelo que construímos até aqui. No modelo do movimento randômico que descrevemos anteriormente eventos tipo cisne negro não têm espaço para ocorrerem. Os deslocamentos performados pelas partículas devem ser pequenos de forma que um evento tipo cisne negro, nesse contexto, seria equivalente a uma partícula sofrer um processo de difusão para uma distância muito longa e discrepante das demais partículas. Isso não ocorre porque um dos vínculos que impomos para a obtenção da distribuição de probabilidade da posição é justamente uma restrição no quanto essas partículas se espalham por meio de uma limitação na variância, resultando em uma distribuição gaussiana.

Para construir uma descrição de sistemas estocásticos em que eventos tipo cisne negro podem ocorrer, precisamos de um modelo em que a distribuição de probabilidade que rege os ruídos tenha um valor relevante para eventos extremos, eventos presentes nas caudas (distribui-

ções leptocúrticas). Portanto, faremos nesse capítulo a apresentação da distribuição estável, um tipo de distribuição com caudas pesadas e em seguida apresentaremos as trajetórias produzidas com essas distribuições. Por fim, analisaremos a probabilidade de ocorrência dessas trajetórias em função da ação clássica das mesmas.

5.1 Distribuição estável

Para começarmos a estudar as distribuições de probabilidade de interesse nessa seção, precisamos estabelecer uma nomenclatura que será muito importante. Em algumas referências uma mesma distribuição recebe diferentes nomes, sendo eles distribuição estável, distribuição de Lévy, distribuição alfa estável ou distribuição alfa estável de Lévy. Isso ocorre pois a distribuição estável possui inúmeros casos específicos, sendo um deles denominado de distribuição de Lévy. Além disso, a distribuição estável foi primeiramente proposta por Paul Lévy em 1920, por essa razão, em alguns lugares o seu nome é utilizado para denominá-la (NOLAN, 2020). Para evitar que confusões ocorram durante a leitura da dissertação, ressaltamos que denominaremos a distribuição estável geral como distribuição estável e a distribuição específica como distribuição de Lévy. Uma vez definida essa nomenclatura, podemos apresentar sua definição.

A distribuição estável é usualmente definida em termos da sua função característica, uma vez que sua distribuição de probabilidade não pode ser escrita analiticamente. A função característica da distribuição estável (KLAGES; RADONS; SOKOLOV, 2008) é

$$\varphi(t; \alpha, \beta, c, \mu) = \exp(it\mu - |ct|^\alpha (1 - i\beta \text{sinal}(t)\Phi)), \quad (5.1)$$

em que

$$\Phi = \begin{cases} \tan\left(\frac{\pi\alpha}{2}\right), & \alpha \neq 1 \\ -\frac{2}{\pi} \log|t|, & \alpha = 1 \end{cases} \quad (5.2)$$

e

$$\text{sinal}(t) = \begin{cases} 1, & \text{para } t > 0 \\ 0 & \text{para } t = 0 \\ -1 & \text{para } t < 0 \end{cases}, \quad (5.3)$$

conhecida como função sinal. As grandezas α , β , c e μ são parâmetros que controlam características específicas da distribuição; α controla o formato da distribuição, sendo ele o responsável pela presença ou não de caudas pesadas, β a assimetria (*skewness*), c a escala (largura) e μ o

deslocamento da posição da curva. O parâmetro α está definido no intervalo $(0, 2]$ e β no intervalo $[-1, 1]$. Um importante resultado sobre a distribuição estável é o de que sua cauda terá comportamento assintótico dado por (KLEINERT, 2009)

$$\lim_{x \rightarrow \infty} P(x) \propto \frac{C(\alpha)}{x^{\alpha+1}}, \quad (5.4)$$

isto é, o decaimento será dado por uma lei de potência, sendo x a variável que está distribuída, em que

$$C(\alpha) = \frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\alpha}{2}\right) \Gamma(1 + \alpha). \quad (5.5)$$

Um caso específico da distribuição estável que já apresentamos na seção 3.2 é a distribuição gaussiana. Ela é o caso específico para $\alpha = 2$; β é um parâmetro irrelevante nesse caso, μ será a média da distribuição e o parâmetro de escala (c) se relaciona com a variância pela relação $\sigma^2 = 2c^2$. De fato, considerando $\alpha = 2$ na equação 5.1, temos

$$\varphi(t) = \exp\left(it\mu - (ct)^2\right), \quad (5.6)$$

uma vez que

$$\Phi = \tan \pi = 0, \quad (5.7)$$

sendo 5.6 a função característica da distribuição gaussiana de média μ e variância $\sigma^2 = 2c^2$, como obtivemos na equação 3.15. A relação entre a variância e o parâmetro de escala será muito importante para tomar as distribuições com caudas pesadas na escala correta do nosso problema.

Os momentos da distribuição estável, com exceção do primeiro momento, divergem para qualquer valor de $\alpha < 2$ (KLEINERT, 2009). Dessa maneira, a variância, a assimetria (*skewness*) e a curtose são indefinidas para qualquer distribuição estável com $\alpha < 2$, uma vez que, como apresentamos na seção 3.2, tais grandezas estão definidas em função do segundo, terceiro e quarto momento.

5.1.1 Distribuição de Lévy

A distribuição de Lévy é usualmente obtida tomando $\alpha = 0,5$ e $\beta = 1$, porém devido a definição do segundo parâmetro a distribuição de Lévy é assimétrica. Para tratar o caso de movimentos randômicos gerados ao redor de uma trajetória clássica, o nosso problema de inte-

resse, uma função assimétrica não é aplicável. Isso se deve ao fato de que precisamos considerar $\mu = 0$ e se temos deslocamentos apenas positivos ou negativos, a trajetória randômica divergir da trajetória clássica. Por essa razão, tomamos o parâmetro de assimetria da distribuição de Lévy como zero, $\beta = 0$, dessa maneira temos uma distribuição simétrica. Assim, temos como função característica para a distribuição de Lévy simétrica,

$$\varphi(t) = \exp\left(it\mu - |ct|^{1/2}\right). \quad (5.8)$$

A distribuição de probabilidade de Lévy simétrica não possui expressão analítica (FAMA; ROLL, 1968), isso é, não podemos expressar analiticamente a transformada de Fourier da equação 5.8. Para verificar as caudas pesadas da distribuição de Lévy simétrica utilizamos o software python para plotar sua distribuição de probabilidade, exibido na figura 5.1.

5.1.2 Distribuição de Cauchy

A distribuição de Cauchy também é um caso específico da distribuição estável, para obtê-la, fazemos $\alpha = 1$ e $\beta = 0$. Dessa maneira, a função característica da distribuição de Cauchy é dada por

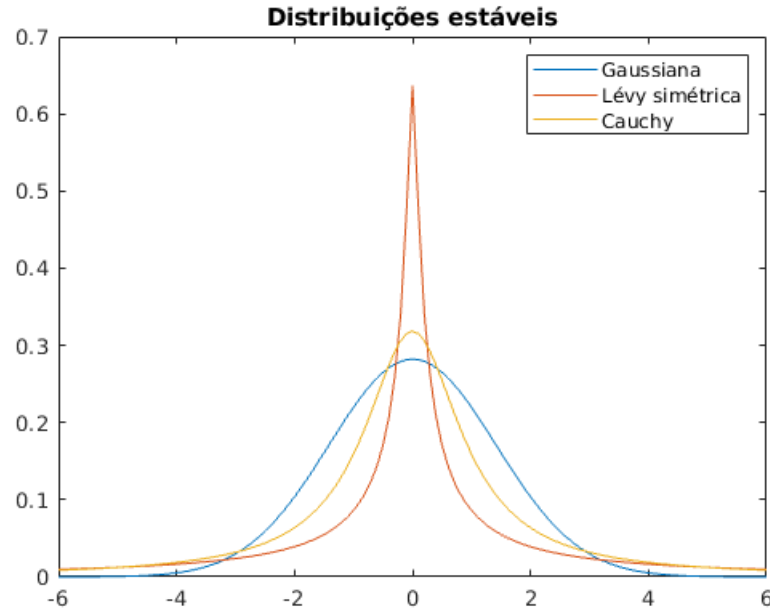
$$\varphi(t) = \exp(it\mu - |ct|). \quad (5.9)$$

Para obter a distribuição de probabilidade, fazemos

$$\begin{aligned} p(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-itx} e^{-|ct|} dt \\ &= \frac{1}{2\pi} \left\{ \int_0^{+\infty} e^{(ix-c)t} dt + \int_0^{+\infty} e^{-(ix+c)t} dt \right\} \\ &= \frac{1}{2\pi} \left\{ \left[\frac{e^{(ix-c)t}}{(ix-c)} \right] \Big|_0^{+\infty} + \left[\frac{e^{-(ix+c)t}}{-(ix+c)} \right] \Big|_0^{+\infty} \right\} \\ &= \frac{1}{2\pi} \left\{ -\frac{1}{(ix-c)} + \frac{1}{(ix+c)} \right\} \\ p(x) &= \frac{c}{\pi(x^2 + c^2)}, \end{aligned} \quad (5.10)$$

sendo a equação 5.10, a distribuição de probabilidade de Cauchy. Na figura 5.1, podemos observar que a distribuição de probabilidade de Cauchy possui caudas mais pesadas do que a distribuição gaussiana.

Figura 5.1 – Gráficos para diferentes casos específicos da distribuição estável.



Fonte: autor

5.2 Difusão anômala

Uma maneira de se classificar processos difusivos é conforme a relação de proporcionalidade entre a variância da posição e o tempo, isto é,

$$\langle x^2 \rangle \propto t^n. \quad (5.11)$$

Para os casos em que $n = 1$ temos a difusão normal, ou seja, um processo difusivo com densidade de posição gaussiana, o movimento browniano, como apresetado na seção 3.4.1. Se temos $n \neq 1$, dizemos que o processo difusivo é anômalo, sendo $n < 1$ a subdifusão e $n > 1$ a superdifusão (LASKIN, 2000).

Para descrever um processo de difusão normal devemos utilizar a abordagem apresentada na seção 3.4.1, já para descrever a difusão anômala devemos realizar generalizações na metodologia da difusão normal. Macroscopicamente, uma das maneiras de se descrever um processo de difusão anômala é por meio da generalização da equação de Fokker-Planck 3.48, expressa na forma

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, t) = D_\alpha \frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha} p(x, t), \quad (5.12)$$

em que o operador diferencial espacial é generalizado para um operador diferencial fracionário de dimensão real α , e possui como solução a distribuição estável com equação característica $\varphi(k) = \exp -D_\alpha dt |k|^\alpha$ (KLAGES; RADONS; SOKOLOV, 2008; METZLER; KLAFTER, 2000; METZLER; KLAFTER, 2004). Ao compararmos este resultado com a equação (5.1) e usando o fato de que $c = \sqrt{Ddt}$, podemos concluir que $D_\alpha dt = (Ddt)^{\alpha/2}$, e tomando $\alpha = 2$ recuperamos a difusão normal, $D_\alpha = D$. Além disso, como apresentado na seção 3.4.1, em que a difusão normal está relacionada com a entropia de Shannon, a difusão anômala está assintoticamente relacionada com a entropia não-aditiva de Tsallis (TSALLIS; SOUZA; MAYNARD, 1995; TSALLIS et al., 1995; TSALLIS; LENZI, 2002; PLASTINO; PLASTINO, 1995; LENZI et al., 2003; KLAGES; RADONS; SOKOLOV, 2008; PREHL; ESSEX; HOFFMANN, 2012; ANDERSON; MORADI; RAFIQ, 2018; SANTOS, 2021), sendo esta uma generalização da entropia de Shannon.

A necessidade da utilização da entropia generalizada no contexto da difusão anômala é consequência do fato do operador diferencial fracionário presente em 5.12 ser não-local, acarretando na existência de ações a distância (interações de longo alcance) (HILFER, 2000). Tal operador pode ser definido por

$$\frac{d^\alpha}{dt^\alpha} f(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{d^n}{dt^n} \int_0^t (t-\tau)^{n-\alpha-1} f(\tau) d\tau, \quad (5.13)$$

em que a existência da dependência das condições globais do fluido pode ser observada na presença do funcional de integração (KLAGES; RADONS; SOKOLOV, 2008; PARADISI et al., 2001).

Devido a natureza destas interações de longo alcance, um sistema que está em processo de difusão anômala não está em conformidade com a entropia de Shannon-Boltzmann-Gibbs uma vez que, para que esta entropia seja aplicável a um sistema, suas interações devem ser de curto alcance (LANDSBERG, 1978; TSALLIS, 1995). Tal limitação fomentou e deu origem ao campo de estudo da termodinâmica não-extensiva que teve origem com o desenvolvimento de generalizações da entropia de Shannon-Boltzmann-Gibbs (ABE; OKAMOTO, 2001; TSALLIS, 1995; GELL-MANN; TSALLIS, 2004).

Por outro lado, na descrição microscópica de um processo de difusão anômala dada pela equação de Langevin, apenas necessitamos modificar a forma como o ruído presente na equação é descrito (KLAGES; RADONS; SOKOLOV, 2008). Para a aplicação em eventos do tipo cisne negro, utilizaremos a distribuição estável na equação de Langevin em um regime conservativo

em um regime de movimento randômico ideal. Desta maneira devemos adequar também a entropia a ser maximizada para obter uma descrição do sistema.

6 PRINCÍPIO DA MÍNIMA AÇÃO ESTOCÁSTICO COM EVENTOS TIPO CISNE NEGRO

Como apresentado no capítulo anterior, o emprego de distribuições estáveis na busca de movimentos randômicos com eventos tipo cisne negros resulta na necessidade de utilizar uma entropia generalizada. Sabendo da íntima relação entre processos de difusão anômala que são regidos pela distribuição estável e a entropia de Tsallis (TSALLIS; SOUZA; MAYNARD, 1995), tomamos tal entropia e a maximizamos considerando os vínculos obtidos para o PMAE para determinar uma nova distribuição de probabilidade de trajetória para o movimento randômico.

6.1 A entropia de Tsallis ou q -entropia

A entropia de Tsallis, ou q -entropia, pode ter sua essência capturada pela presença de um expoente na probabilidade presente na definição da entropia. Desta maneira temos uma maior contribuição de eventos pouco prováveis o que faz com que tal entropia seja adequada para a descrição de eventos "extremos" (TSALLIS, 1988; TSALLIS, 2021). Matematicamente ela está definida em função de uma generalização da função logarítmica, o q -logaritmo, sendo sua forma matemática

$$S_q = - \sum_k p_k^q \ln_q p_k. \quad (6.1)$$

O q -logaritmo, por sua vez, é definido como

$$\ln_q x = \frac{x^{1-q} - 1}{1 - q}, \quad (6.2)$$

logo, podemos reescrever a q -entropia explicitamente como

$$S_q = \left(\frac{1 - \sum_k p_k^q}{q - 1} \right). \quad (6.3)$$

Assim como a função exponencial é a inversa do logaritmo, o q -logaritmo possui como inversa a função q -exponencial,

$$e_q^x = [1 + (1 - q)x]^{\frac{1}{1-q}}. \quad (6.4)$$

A entropia proposta por Tsallis é uma generalização da entropia de Shannon-Boltzmann-Gibbs. Sendo assim, dentro de um determinado limite devemos recuperar a fórmula tradicional.

De fato, se tomamos o limite de $q \rightarrow 1$, temos que $\ln_{q \rightarrow 1}(x) = \ln(x)$, assim retornando à entropia já conhecida.

Além disso, como estamos lidando com uma generalização, inúmeras propriedades devem ser compartilhadas entre as duas formulações, e de fato todas as propriedades (concavidade, extensividade, etc.) são comuns entre as duas entropias com exceção de uma: a aditividade (TSALLIS, 1988), isto é, se temos dois sistemas distintos A e B , a entropia da soma dos dois sistemas não resulta na soma da entropia dos dois sistemas. Na verdade, a entropia de Tsallis é pseudo-aditiva,

$$S_q(A+B) = S_q(A) + S_q(B) + (1-q)S_q(A)S_q(B), \quad (6.5)$$

recuperando a aditividade quando $q \rightarrow 1$, como esperado.

Uma outra propriedade muito importante, em especial no contexto da termodinâmica, é a extensividade, necessária para que o segundo postulado da mecânica estatística seja válido, possibilitando a conexão entre a mecânica estatística e a termodinâmica macroscópica (SALLINAS, 1997). A extensividade consiste no fato de que para um sistema de N partículas, a entropia deve ser diretamente proporcional a N , $S \propto N$. No contexto da entropia de Tsallis essa propriedade pode ser satisfeita impondo um vínculo em q com a forma

$$q = 1 - \frac{1}{\rho}, \quad (6.6)$$

em que,

$$S_q(N) \propto N^{\rho(1-q)}. \quad (6.7)$$

Utilizando este vínculo, a entropia de Tsallis é aplicável a sistemas termodinâmicos (TSALLIS, 2009).

No contexto da teoria da informação, escopo onde se encontra o presente trabalho, a extensividade não é uma propriedade limitante. Como proposto pelo teorema de Shannon (SHANNON, 1948), a entropia de informação (S) deve satisfazer as seguintes propriedades:

- Ser contínua em p_i ;
- Quando todas as probabilidades forem iguais, a entropia deve ser uma função monotônica crescente, isto é, quando a quantidade de eventos cresce a entropia também cresce;
- A entropia deve ser aditiva.

Porém, uma generalização do teorema de Shannon (SANTOS, 1997) foi estabelecida para sistemas estatísticos não-extensivos, modificando a aditividade pela pseudo-aditividade conforme (6.5). Dessa forma, a entropia de Tsallis se estabelece também para a teoria da informação.

Desde seu desenvolvimento, esta generalização da entropia tem sido aplicada em uma quantidade considerável de sistemas de mecânica estatística não-extensiva. Ventos solares, física de altas energias, dinâmica não linear, interações de longa distância, processos não-Markovianos, entre outros (TSALLIS, 2009; TSALLIS, 2021). É importante ressaltar que a entropia de Tsallis já foi aplicada em movimentos randômicos com distribuição estável como os que descrevemos nesse trabalho (TSALLIS; BUKMAN, 1996), a originalidade em nosso trabalho consiste em associar a ação com a probabilidade de trajetória desses movimentos.

6.2 Desenvolvimento da distribuição de probabilidade de trajetória

Como apresentado na seção 3.3, o princípio da mínima ação estocástico deve satisfazer os seguintes vínculos

$$\delta(S - \gamma \sum_k p_k A_k + \alpha \sum_k p_k) = 0, \quad (6.8)$$

porém para essa formulação, devemos modificar $S \rightarrow S_q$, isto é, utilizar a q -entropia. Além disso, como muito bem discutido na referência (TSALLIS; MENDES; PLASTINO, 1998), é necessário modificar a definição do valor esperado para que sejam evitados problemas como divergência da função de partição, energia não-aditiva e para que as estruturas das transformações de Legendre da termodinâmica continuem válidas. Assim, redefinimos o valor esperado como

$$\frac{\sum_k p_k^q A_k}{\sum_k p_k^q} = \langle A \rangle. \quad (6.9)$$

Fazendo as considerações citadas acima, temos que, para obter a nova distribuição de probabilidade de trajetória, devemos maximizar a lagrangiana que se segue, como determinado pelo princípio de Jaynes,

$$\mathcal{L} = \left(\frac{1 - \sum_k p_k^q}{q - 1} \right) + \alpha \left(\sum_k p_k - 1 \right) - \gamma \left(\frac{\sum_k p_k^q A_k}{\sum_k p_k^q} - \langle A \rangle \right). \quad (6.10)$$

Logo, aplicando a equação de Euler-Lagrange, $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial p_j} = 0$, em (6.10), desenvolvemos,

$$\begin{aligned} \frac{-\sum_k q p_k^{q-1} \delta_{jk}}{q-1} + \alpha \sum_k \delta_{jk} - \gamma \frac{\left(\sum_k q p_k^{q-1} \delta_{jk} A_k\right) \left(\sum_k p_k^q\right) - \left(\sum_k p_k^q A_k\right) \left(\sum_k q p_k^{q-1} \delta_{jk}\right)}{\left(\sum_k p_k^q\right)^2} &= 0 \\ \frac{q}{q-1} p_j^{q-1} - \alpha + \gamma \frac{\left(q p_j^{q-1} A_j\right) \left(\sum_k p_k^q\right) - \langle A \rangle \left(\sum_k p_k^q\right) \left(q p_j^{q-1}\right)}{\left(\sum_k p_k^q\right)^2} &= 0 \\ \frac{q}{q-1} p_j^{q-1} - \alpha + \gamma \left(q p_j^{q-1}\right) \left[\frac{A_j - \langle A \rangle}{\sum_k p_k^q}\right] &= 0. \end{aligned}$$

Isolando p_j , temos,

$$p_j = \alpha \left[\frac{q}{q-1} + \gamma q \left(\frac{A_j - \langle A \rangle}{\sum_k p_k^q} \right) \right]^{-\frac{1}{q-1}}. \quad (6.11)$$

Substituindo (6.11) no vínculo de normalização, $\sum_k p_k = 1$, encontramos

$$\alpha = \sum_j \left[\frac{q}{q-1} + \gamma q \left(\frac{A_j - \langle A \rangle}{\sum_k p_k^q} \right) \right]^{\frac{1}{q-1}}, \quad (6.12)$$

que ao ser substituído em (6.11), retorna

$$p_j = \sum_j \left[\frac{q}{q-1} + \gamma q \left(\frac{A_j - \langle A \rangle}{\sum_k p_k^q} \right) \right]^{\frac{1}{q-1}} \left[\frac{q}{q-1} + \gamma q \left(\frac{A_j - \langle A \rangle}{\sum_k p_k^q} \right) \right]^{-\frac{1}{q-1}}, \quad (6.13)$$

a distribuição de probabilidade de trajetória. Podemos reorganizar a equação acima para

$$p_j = \frac{\left[1 - (1-q) \gamma \left(\frac{A_j - \langle A \rangle}{\sum_k p_k^q} \right) \right]^{\frac{1}{1-q}}}{\sum_j \left[1 - (1-q) + \gamma \left(\frac{A_j - \langle A \rangle}{\sum_k p_k^q} \right) \right]^{\frac{1}{1-q}}}. \quad (6.14)$$

Como podemos observar em (6.14), o peso da probabilidade deve ser redefinido para

$$\gamma' \equiv \frac{\gamma}{\sum_k p_k^q}. \quad (6.15)$$

Além disso, os valores de ação das trajetórias devem ser deslocados, ou seja,

$$A'_j \equiv A_j - A_c, \quad (6.16)$$

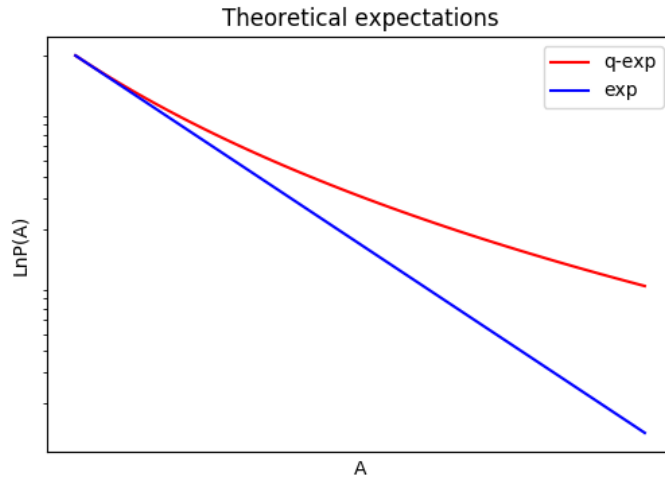
sendo, A_c a ação clássica, ou seja, $\langle A \rangle = A_c$, uma vez que as trajetórias são construídas por distribuições simétricas ao redor da trajetória clássica.

Assim, utilizando a definição da q -exponencial, podemos denotar a distribuição de probabilidade de trajetória como

$$p_j = \frac{e_q^{-\gamma A'_j}}{Z_q}, \quad (6.17)$$

em que $Z_q = \sum_j e_q^{-\gamma A'_j}$ é a função de partição. Esperamos, portanto, que os resultados das simulações de probabilidade de trajetória para o movimento randômico com distribuições estáveis sejam dispostos como uma q -exponencial com $\gamma < 0$ e $q \geq 1$, vide figura (6.1).

Figura 6.1 – Representação das funções exponencial e q -exponencial.



Fonte: autor

7 SIMULAÇÕES COM A ENTROPIA DE TSALLIS

Como apresentado pelo resultado teórico do capítulo anterior, esperamos que as probabilidades de trajetória do movimento randômico regido por distribuições estáveis com caudas pesadas se comportem conforme a função de partição obtida por meio da maximização da entropia de Tsallis. Para verificar esse resultado, realizamos as simulações dos movimentos randômicos buscando o *fit* com essa nova função de partição que possui um novo parâmetro livre, q .

Para aprimorar o resultado por meio do aumento da amostragem de probabilidades de trajetória, ampliamos o número de trajetórias para $1,5 \times 10^5$ e mantemos o número de lançamentos em 10^2 . Devido ao aumento do custo computacional foi utilizado o *cluster* computacional do Departamento de Física da Universidade Federal e Lavras. Além disso contamos com a colaboração do Dr. Fábio Lúcio Alves, Universidade de Nanjing (China), e do Dr. Qiuping Alexandre Wang, Universidade de Le Mans (França).

Como sabemos que as funções exponenciais, sejam elas generalizadas ou não, tendem muito rapidamente ao decrescimento, para melhorar o processo de *fit* utilizamos a função logarítmica. Assim, tendo como função a ser obtida

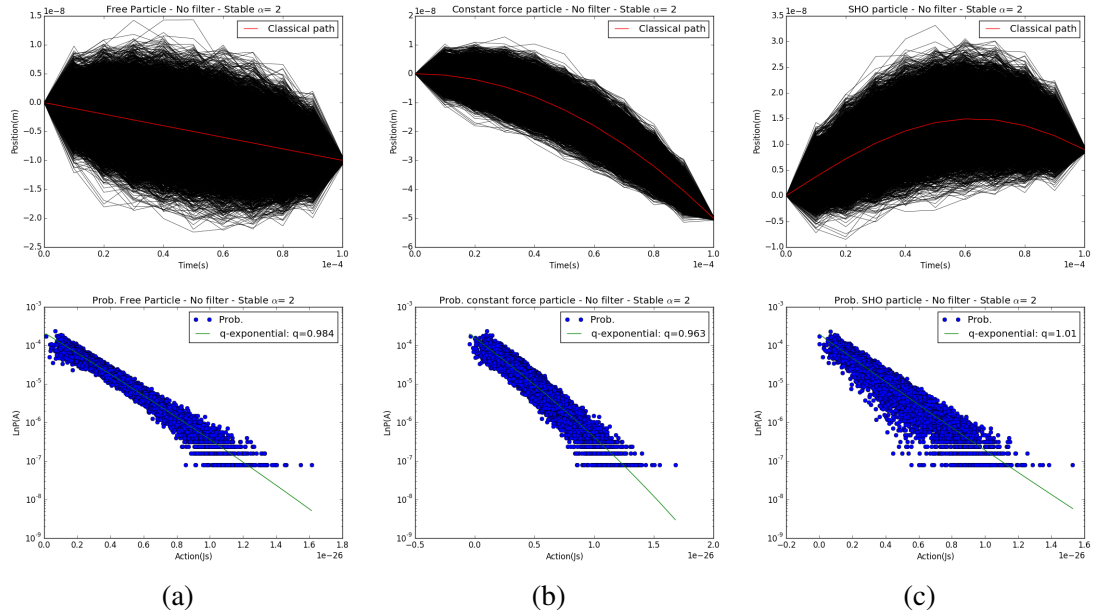
$$\ln(p_k) = C + \frac{\ln[1 + \gamma(1 - q)A_k]}{1 - q}, \quad (7.1)$$

sendo p_k e A_k , respectivamente, a probabilidade e a ação da k -ésima trajetória, $C = \ln\left(\frac{1}{Z_q}\right)$, γ o peso da função distribuição de probabilidade e q o parâmetro de generalização da exponencial.

7.1 Resultados: simulações sem vínculos

- Simulações com distribuição estável e $\alpha = 2$ (Gaussiana):

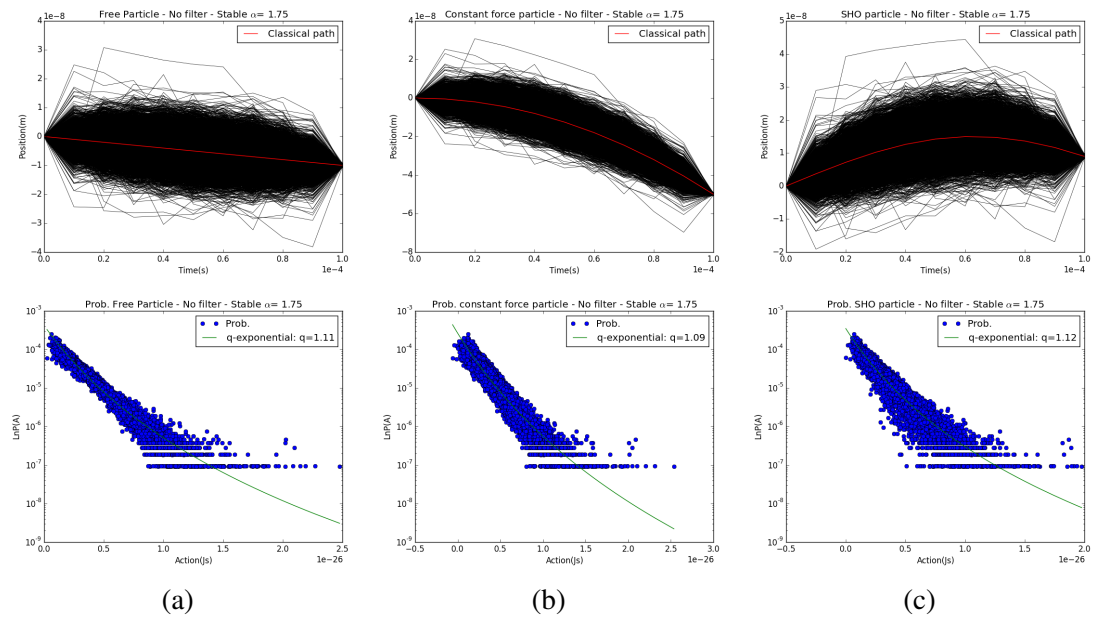
Figura 7.1 – Simulações para os diferentes potenciais com $\alpha = 2$. Potencial nulo (esquerda), potencial linear (centro) e potencial quadrático (direita).



Fonte: autor

- Simulações com distribuição estável e $\alpha = 1.75$:

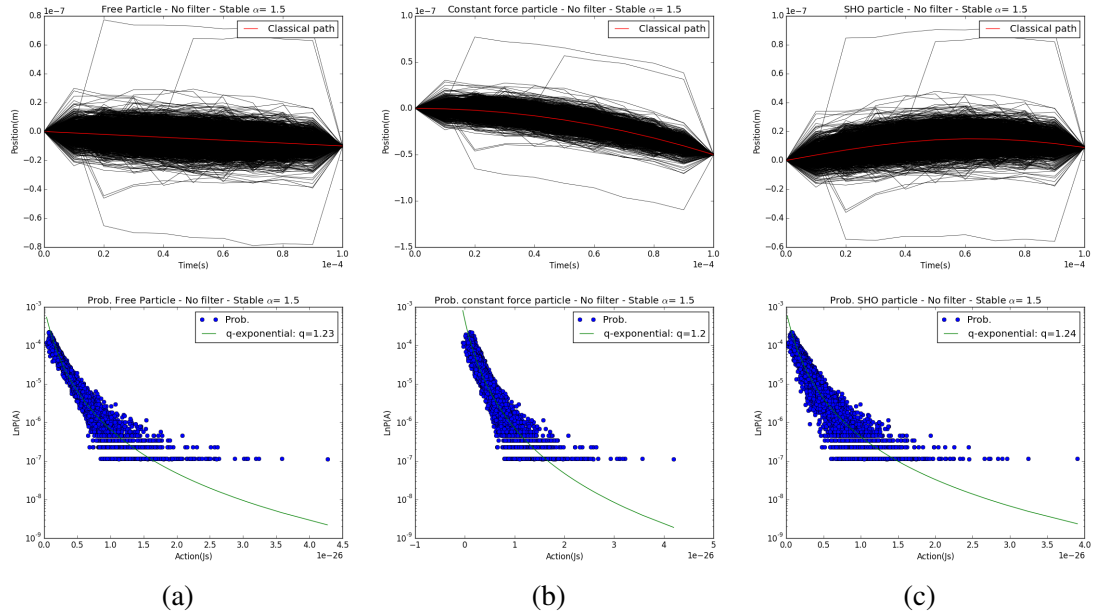
Figura 7.2 – Simulações para os diferentes potenciais com $\alpha = 1.75$. Potencial nulo (esquerda), potencial linear (centro) e potencial quadrático (direita).



Fonte: autor

- Simulações com distribuição estável e $\alpha = 1.5$:

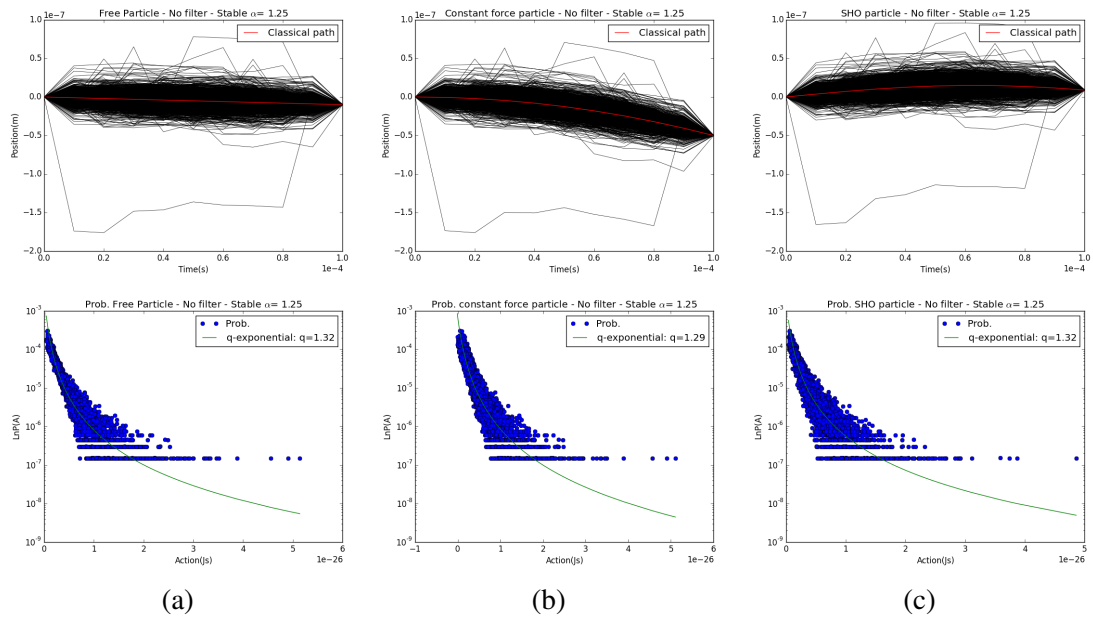
Figura 7.3 – Simulações para os diferentes potenciais com $\alpha = 1.5$. Potencial nulo (esquerda), potencial linear (centro) e potencial quadrático (direita).



Fonte: autor

- Simulações com distribuição estável e $\alpha = 1.25$:

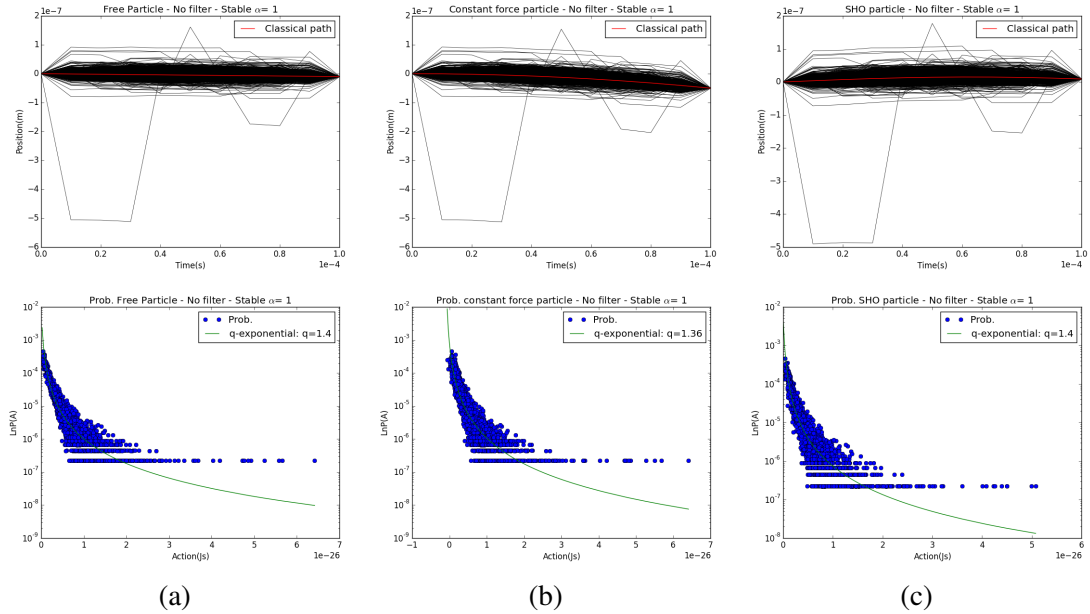
Figura 7.4 – Simulações para os diferentes potenciais com $\alpha = 1.25$. Potencial nulo (esquerda), potencial linear (centro) e potencial quadrático (direita).



Fonte: autor

- Simulações com distribuição $\alpha = 1$ (Cauchy):

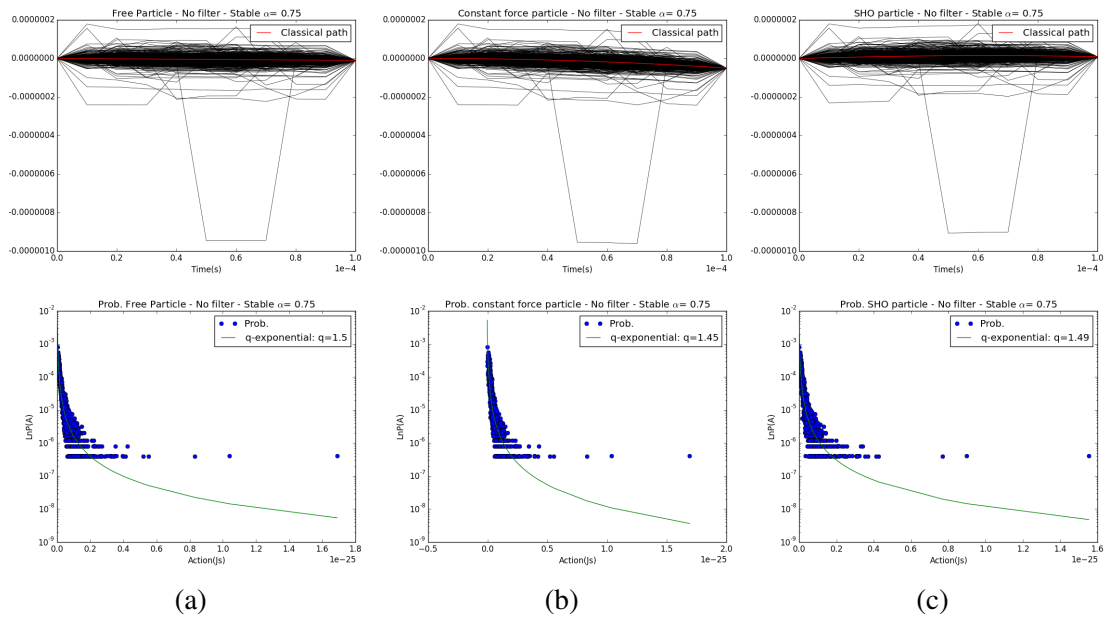
Figura 7.5 – Simulações para os diferentes potenciais com $\alpha = 1$. Potencial nulo (esquerda), potencial linear (centro) e potencial quadrático (direita).



Fonte: autor

- Simulações com distribuição $\alpha = 0.75$:

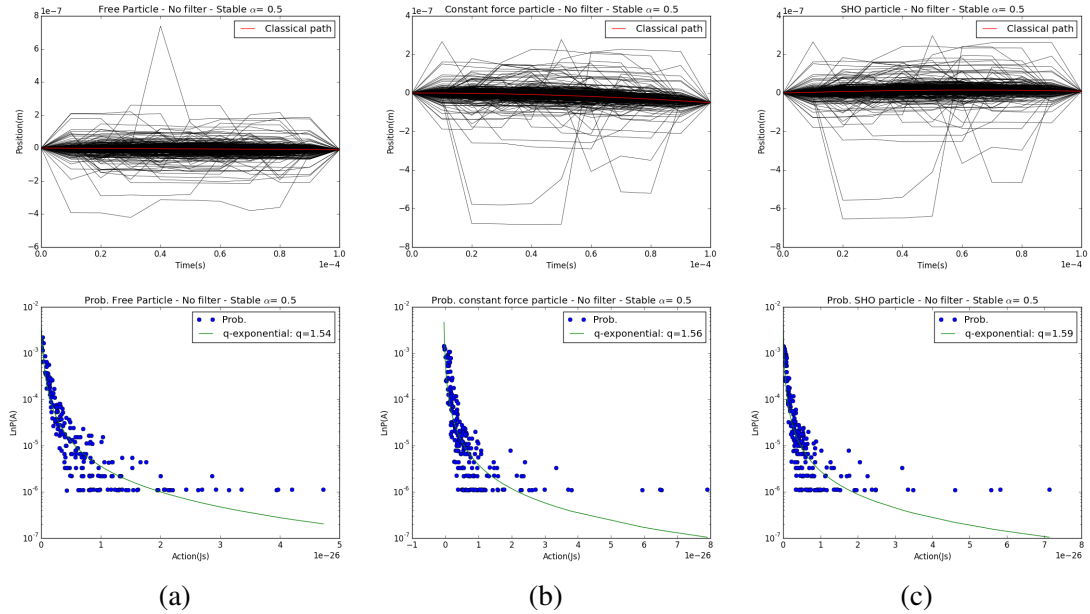
Figura 7.6 – Simulações para os diferentes potenciais com $\alpha = 0.75$. Potencial nulo (esquerda), potencial linear (centro) e potencial quadrático (direita).



Fonte: autor

- Simulações com distribuição $\alpha = 0.5$ (Lévy):

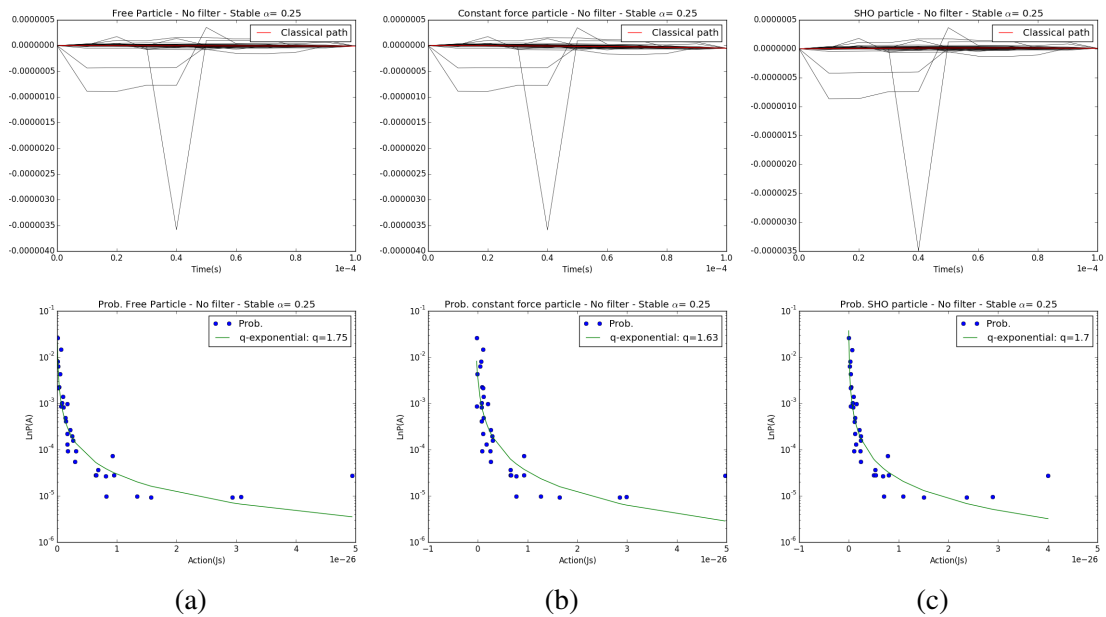
Figura 7.7 – Simulações para os diferentes potenciais com $\alpha = 0.5$. Potencial nulo (esquerda), potencial linear (centro) e potencial quadrático (direita).



Fonte: autor

- Simulações com distribuição $\alpha = 0.25$:

Figura 7.8 – Simulações para os diferentes potenciais com $\alpha = 0.25$. Potencial nulo (esquerda), potencial linear (centro) e potencial quadrático (direita).



Fonte: autor

Considerações

Como podemos observar, as distribuições de probabilidade de trajetória são proporcionais à q -exponencial da ação. Os resultados numéricos estão presentes nas tabelas (7.1) e (7.2). Assim, podemos concluir que o movimento randômico com distribuições estáveis é melhor descrito pelo Princípio da Mínima Ação Estocástico ao utilizarmos a entropia de Tsallis. Além disso podemos observar que $q \propto \alpha$, ou seja, quanto mais pesadas são as caudas das distribuições, maior é o valor do parâmetro q .

Tabela 7.1 – Valores de q e sua incerteza estatística para diferentes simulações sem filtro.

α	Nulo		Linear		Quadrático	
	q	q-erro	q	q-erro	q	q-erro
2	0.984	0.002	0.963	0.003	1.009	0.004
1.75	1.113	0.002	1.092	0.003	1.124	0.004
1.5	1.227	0.003	1.203	0.004	1.236	0.004
1.25	1.315	0.005	1.286	0.005	1.322	0.006
1	1.396	0.007	1.358	0.007	1.398	0.008
0.75	1.497	0.012	1.448	0.013	1.492	0.013
0.5	1.536	0.027	1.558	0.035	1.593	0.032
0.25	1.749	0.078	1.633	0.117	1.695	0.072

Tabela 7.2 – Valores de γ e sua incerteza estatística para diferentes simulações sem filtro.

α	Nulo		Linear		Quadrático	
	γ	γ -erro	γ	γ -erro	γ	γ -erro
2	-6.07×10^{26}	4.87×10^{24}	-5.31×10^{26}	6.14×10^{24}	-7.16×10^{26}	1.09×10^{25}
1.75	-1.00×10^{26}	1.53×10^{25}	-8.28×10^{26}	1.45×10^{25}	-1.13×10^{27}	2.50×10^{25}
1.5	-1.90×10^{27}	6.80×10^{25}	-1.33×10^{27}	4.28×10^{25}	-2.08×10^{27}	9.03×10^{25}
1.25	-3.88×10^{27}	3.49×10^{26}	-2.01×10^{27}	1.15×10^{26}	-4.01×10^{27}	3.82×10^{26}
1	-1.11×10^{28}	3.25×10^{27}	-2.68×10^{27}	2.17×10^{26}	-8.68×10^{27}	1.91×10^{27}
0.75	-8.45×10^{29}	2.15×10^{31}	-2.74×10^{27}	2.79×10^{26}	-1.36×10^{28}	5.25×10^{27}
0.5	-9.60×10^{27}	4.32×10^{27}	-3.04×10^{27}	4.62×10^{26}	-2.16×10^{28}	1.66×10^{28}
0.25	-5.94×10^{28}	1.50×10^{29}	-2.72×10^{27}	1.11×10^{27}	-1.46×10^{28}	6.98×10^{27}

7.2 Resultados: simulações com filtro na energia

Criamos, agora, um vínculo na energia de cada trajetória, ou seja, criamos uma limitação no trabalho realizado pela força randômica R presente na descrição de Langevin conforme apresentada na seção (4.3). Isso significa que as flutuações ao redor da trajetória clássica são limitadas a uma dada quantidade de energia, e se fazemos este valor limite tender a zero, recuperamos a trajetória clássica.

Para executar esse procedimento, adicionamos um filtro em relação à energia gasta nos deslocamentos randômicos. Calculamos a energia da soma dos deslocamentos randômicos de cada trajetória como

$$K_r = \sum_{i=1}^{10} \frac{m}{2} \left[\frac{\chi_i - \chi_{i-1}}{t_i - t_{i-1}} \right]^2 \quad (7.2)$$

e descartamos as trajetórias que ultrapassam o valor limite de energia definido por

$$f_e = d \times K_0, \quad (7.3)$$

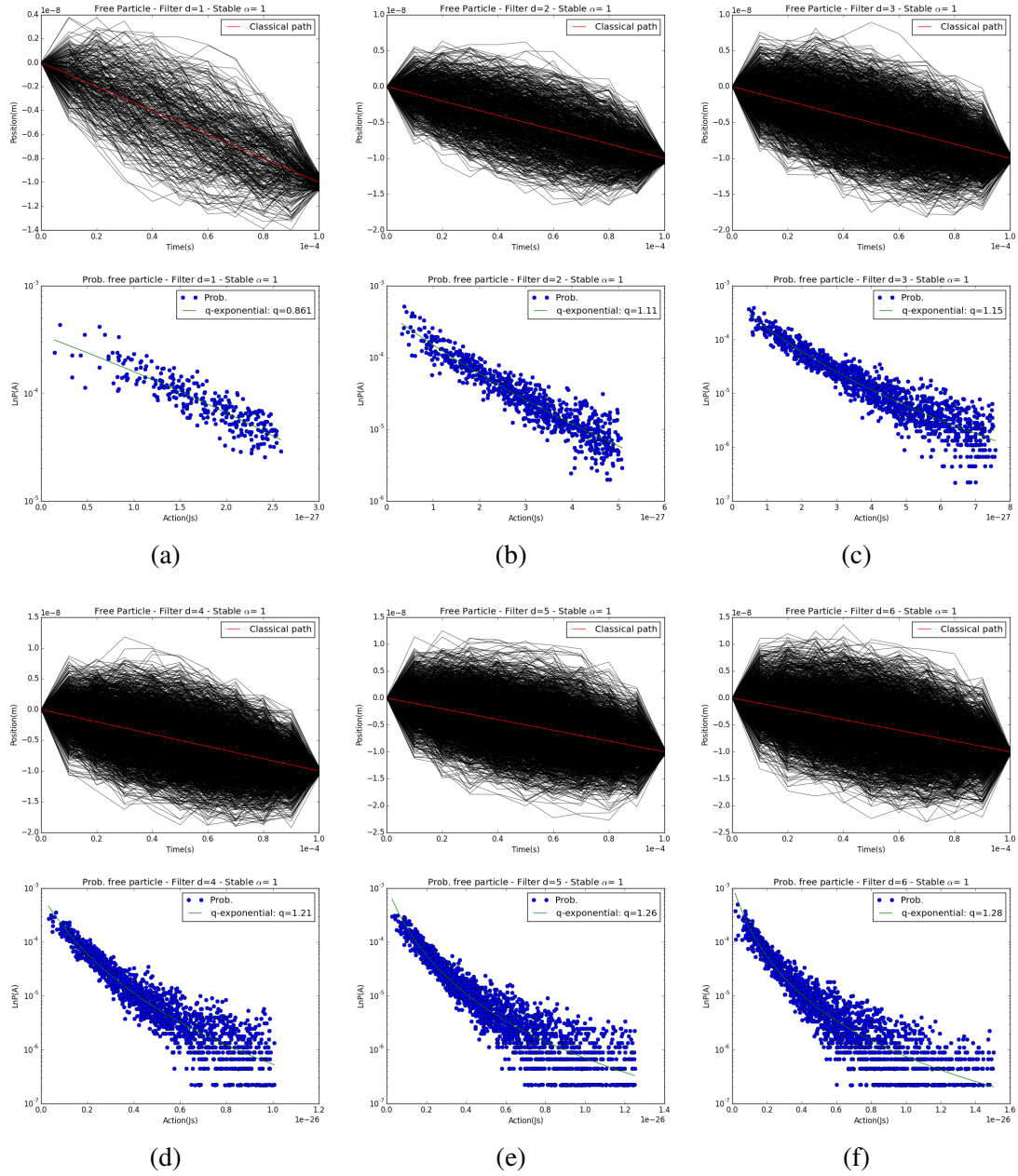
sendo d um número inteiro e $K_0 = 0,25 \times 10^{-21} J$, a energia das primeiras trajetórias que aparecem na simulação gaussiana.

Variando os valores do parâmetro d e tomando as distribuições de Cauchy e Lévy para os deslocamentos randômicos obtemos os resultados que seguem.

7.2.1 Simulações para partículas livres

- Simulações com distribuição de Cauchy ($\alpha = 1$):

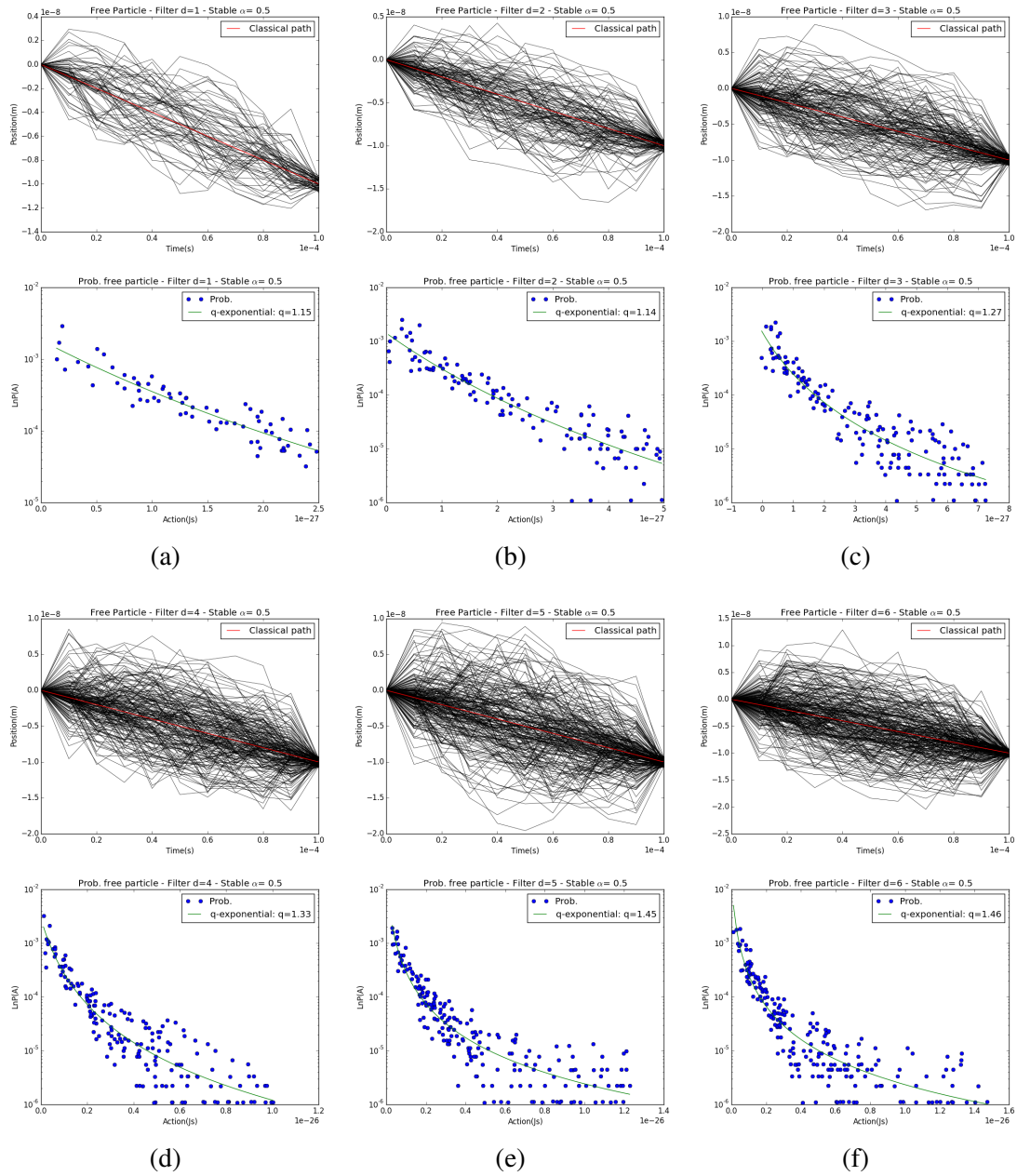
Figura 7.9 – Simulações com filtro na energia, partículas livres e $\alpha = 1$.



Fonte: autor

- Simulações com distribuição de Lévy ($\alpha = 0.5$):

Figura 7.10 – Simulações com filtro na energia, partículas livres e $\alpha = 0.5$.



Fonte: autor

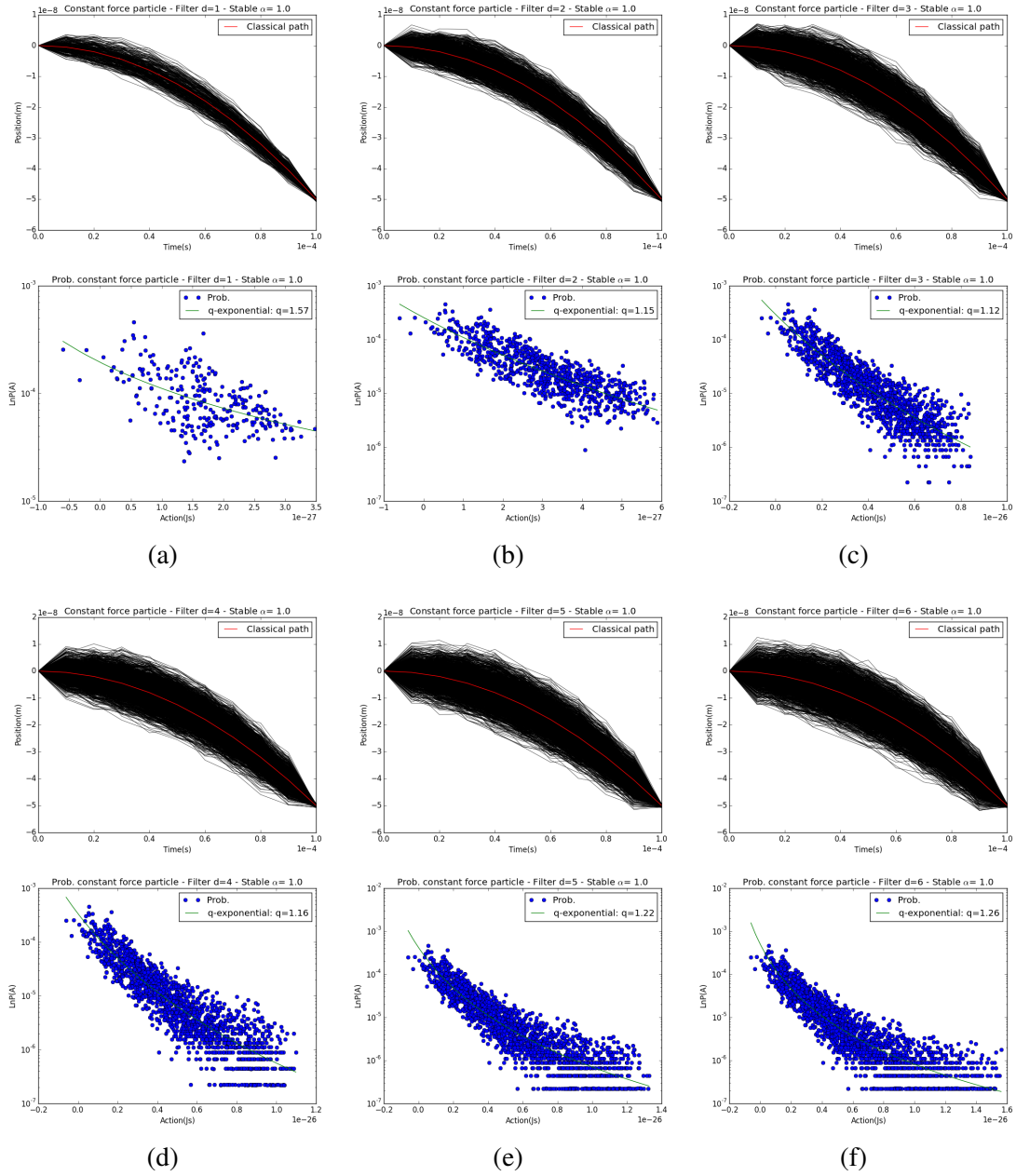
Tabela 7.3 – Resultados numéricos das simulações com filtro na energia, partículas livres e distribuição Cauchy e Lévy.

d	$\alpha = 1$				$\alpha = 0.5$			
	q	q -erro	γ	γ -erro	q	q -erro	γ	γ -erro
1	0.861	0.124	-7.44×10^{26}	1.16×10^{26}	1.146	0.112	-1.86×10^{27}	4.84×10^{26}
2	1.109	0.026	-1.09×10^{27}	8.37×10^{25}	1.141	0.058	-1.70×10^{27}	3.54×10^{26}
3	1.150	0.015	-1.28×10^{27}	8.94×10^{25}	1.272	0.044	-2.32×10^{27}	5.12×10^{27}
4	1.207	0.012	-1.71×10^{27}	1.36×10^{26}	1.326	0.033	-3.56×10^{27}	9.13×10^{26}
5	1.260	0.010	-2.23×10^{27}	2.01×10^{26}	1.451	0.030	-1.27×10^{28}	9.57×10^{27}
6	1.281	0.009	-2.48×10^{27}	2.26×10^{26}	1.459	0.029	-1.18×10^{27}	7.45×10^{26}

7.2.2 Simulações para Partículas sujeitas a uma força constante

- Simulações com distribuição de Cauchy ($\alpha = 1$):

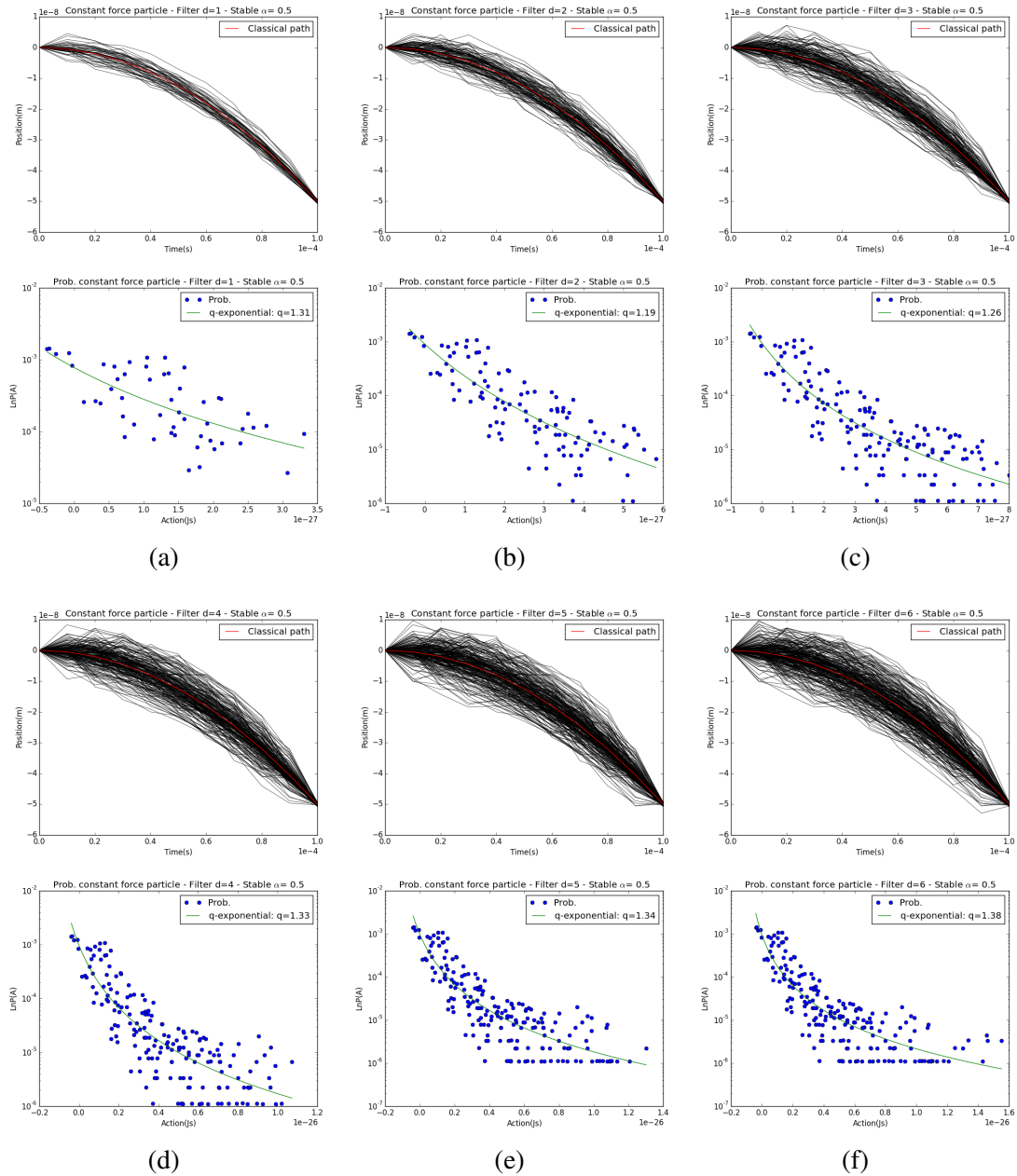
Figura 7.11 – Simulações com filtro na energia, partículas sujeitas a uma força constante e $\alpha = 1$.



Fonte: autor

- Simulações com distribuição de Lévy ($\alpha = 0.5$):

Figura 7.12 – Simulações com filtro na energia, partículas sujeitas a uma força constante e $\alpha = 0,5$.



Fonte: autor

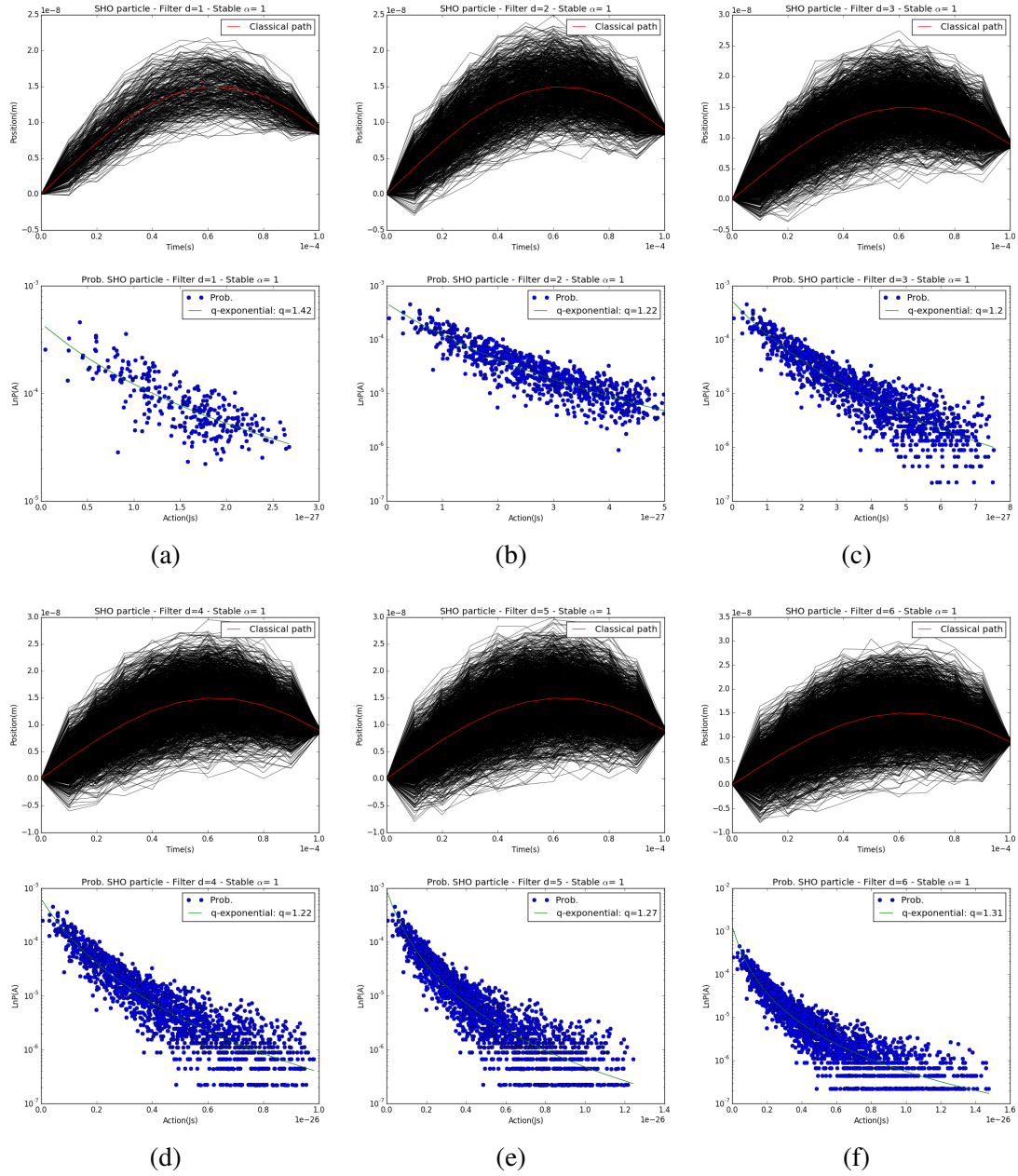
Tabela 7.4 – Resultados numéricos das simulações com filtro na energia, partículas com aceleração constante e distribuição Cauchy e Lévy.

d	$\alpha = 1$				$\alpha = 0.5$			
	q	q -erro	γ	γ -erro	q	q -erro	γ	γ -erro
1	1.566	0.360	-6.59×10^{26}	2.09×10^{26}	1.307	0.357	-1.19×10^{27}	5.03×10^{26}
2	1.145	0.046	-9.08×10^{26}	1.03×10^{26}	1.188	0.086	-1.55×10^{27}	4.07×10^{26}
3	1.123	0.021	-9.77×10^{26}	7.58×10^{25}	1.257	0.056	-1.81×10^{27}	4.11×10^{26}
4	1.159	0.014	-1.11×10^{27}	7.60×10^{25}	1.326	0.045	-2.12×10^{27}	4.50×10^{26}
5	1.215	0.015	-1.37×10^{27}	9.77×10^{25}	1.339	0.040	-2.17×10^{27}	4.42×10^{25}
6	1.256	0.010	-1.64×10^{27}	1.22×10^{26}	1.376	0.038	-2.37×10^{27}	4.68×10^{26}

7.2.3 Simulações para Partículas sujeitas a uma força restaurativa

- Simulações com distribuição de Cauchy ($\alpha = 1$):

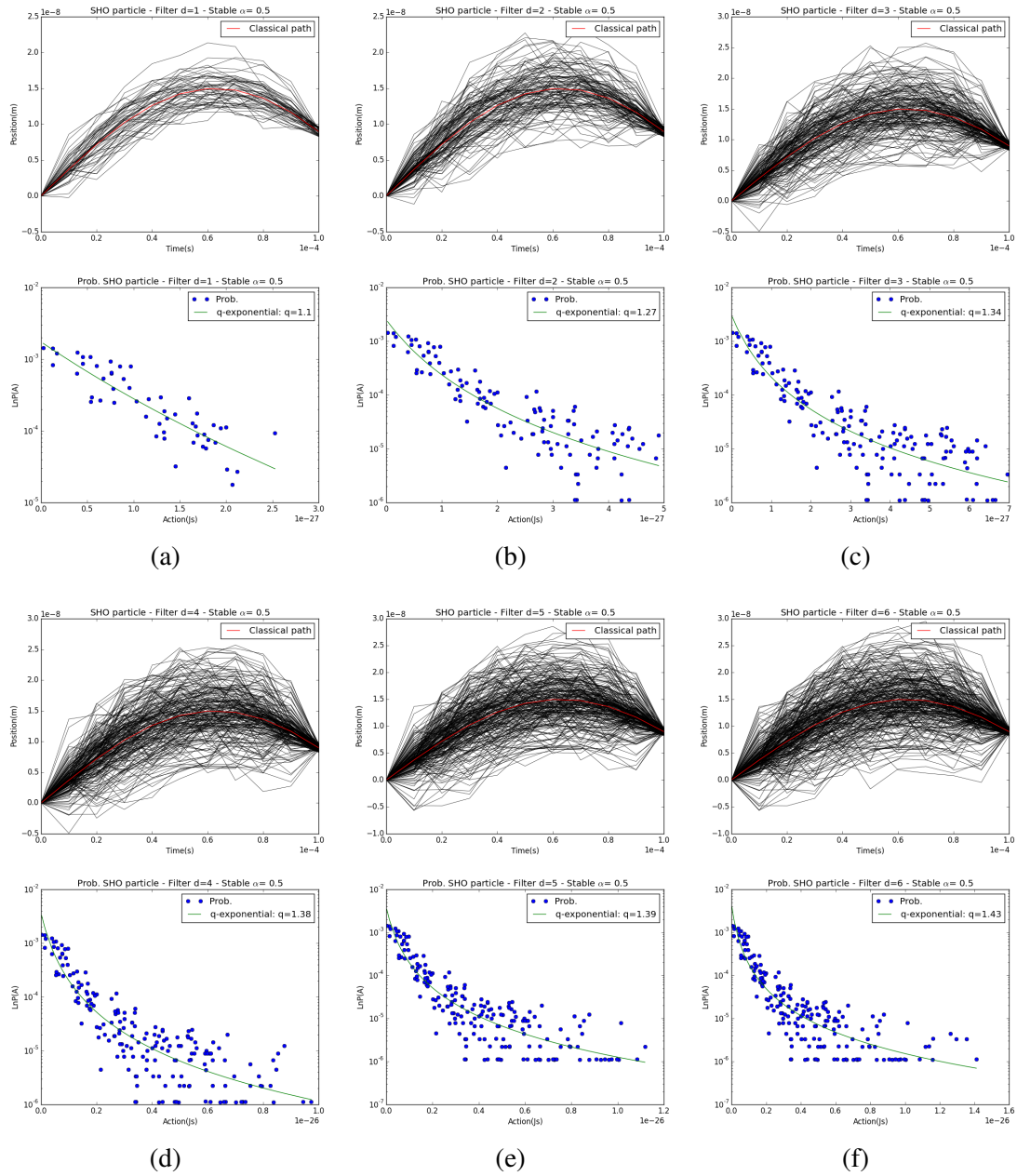
Figura 7.13 – Simulações com filtro na energia, partículas sujeitas a uma força restaurativa e $\alpha = 1$.



Fonte: autor

- Simulações com distribuição de Lévy ($\alpha = 0.5$):

Figura 7.14 – Simulações com filtro na energia, partículas sujeitas a uma força restaurativa e $\alpha = 0.5$.



Fonte: autor

Tabela 7.5 – Resultados numéricos das simulações com filtro na energia, partículas em oscilação harmônica e distribuição Cauchy e Lévy.

d	$\alpha = 1$				$\alpha = 0,5$			
	q	q -erro	γ	γ -erro	q	q -erro	γ	γ -erro
1	1.415	0.153	-1.73×10^{27}	5.78×10^{26}	1.104	0.159	-2.01×10^{27}	7.02×10^{26}
2	1.217	0.034	-1.58×10^{27}	1.95×10^{26}	1.267	0.064	-3.27×10^{27}	1.09×10^{26}
3	1.196	0.018	-1.63×10^{27}	1.53×10^{26}	1.336	0.047	-4.32×10^{27}	1.50×10^{27}
4	1.223	0.013	-1.89×10^{27}	1.67×10^{26}	1.375	0.039	-5.23×10^{27}	1.85×10^{27}
5	1.271	0.011	-2.49×10^{27}	2.46×10^{26}	1.391	0.036	-5.67×10^{27}	2.02×10^{25}
6	1.308	0.009	-3.22×10^{27}	3.65×10^{26}	1.428	0.034	-7.03×10^{27}	2.78×10^{26}

Considerações

Aplicar o vínculo na energia dos deslocamentos aleatórios permite melhorar a precisão dos resultados. Além disso, a medida que os deslocamentos têm maior energia, ou seja, são maiores, maior é o valor de q . Porém, é importante ressaltar que, se impomos uma restrição muito forte no valor da energia, a probabilidade de trajetória não se cumpre. Esse resultado se deve a imprecisão da simulação, pois para esses casos as trajetórias randômicas possuem valores de ação muito próximos e devido à aproximação no cálculo dessa grandeza, não conseguimos capturar a relação entre probabilidade e ação.

7.3 Resultados: simulações com distribuições truncadas

Outra estratégia para controlar os resultados da simulação é a utilização de distribuições de probabilidade truncadas. Tal processo consiste em impor um limite para o seu valor máximo e valor mínimo da distribuição. Ao realizarmos tal procedimento com a distribuição estável, o segundo momento central não diverge e assim possuímos uma variância definida para distribuições estáveis com $\alpha \neq 2$ (KLEINERT, 2009).

Não encontramos biblioteca para distribuições truncadas no Python, por essa razão realizamos o procedimento utilizando um filtro de tal maneira que, trajetórias randômicas e movimentos de partículas com deslocamentos maiores do que o valor do truncamento são desconsiderados na simulação. Construímos o valor do filtro do truncamento proporcional ao desvio padrão da distribuição gaussiana (σ_g), isto é,

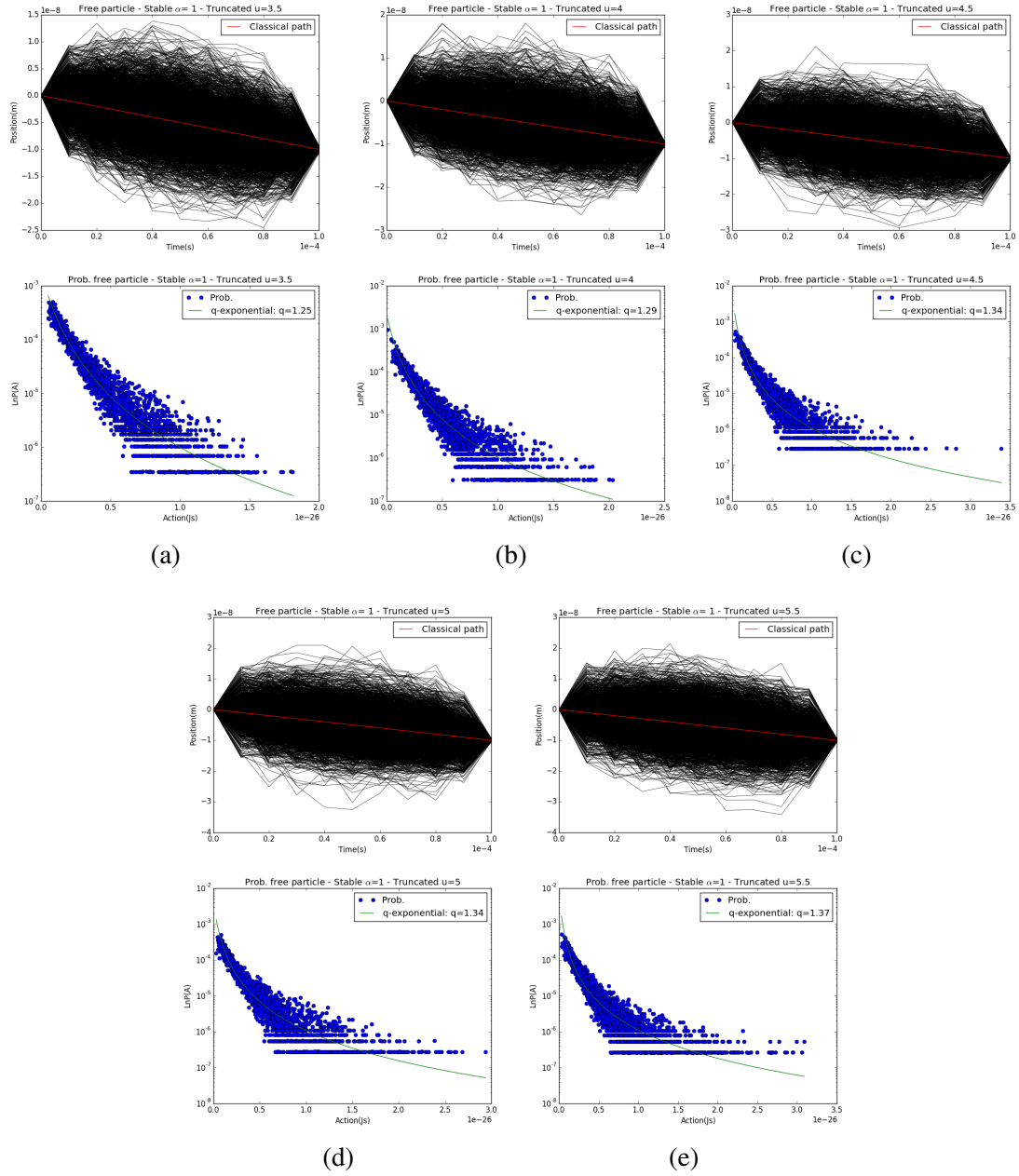
$$T = u \times \sigma_g, \quad (7.4)$$

em que u é o termo que rege a proporção. Sabendo que 99.7% dos valores distribuídos por uma distribuição gaussiana estão dentro de uma distância de 3 vezes o seu desvio padrão (DEVORE, 2011), começamos, portanto, a variar u a partir de 3.5, uma vez que estamos interessados em observar o efeito das caudas pesadas.

7.3.1 Simulações para partículas livres

- Simulações com distribuição de Cauchy ($\alpha = 1$):

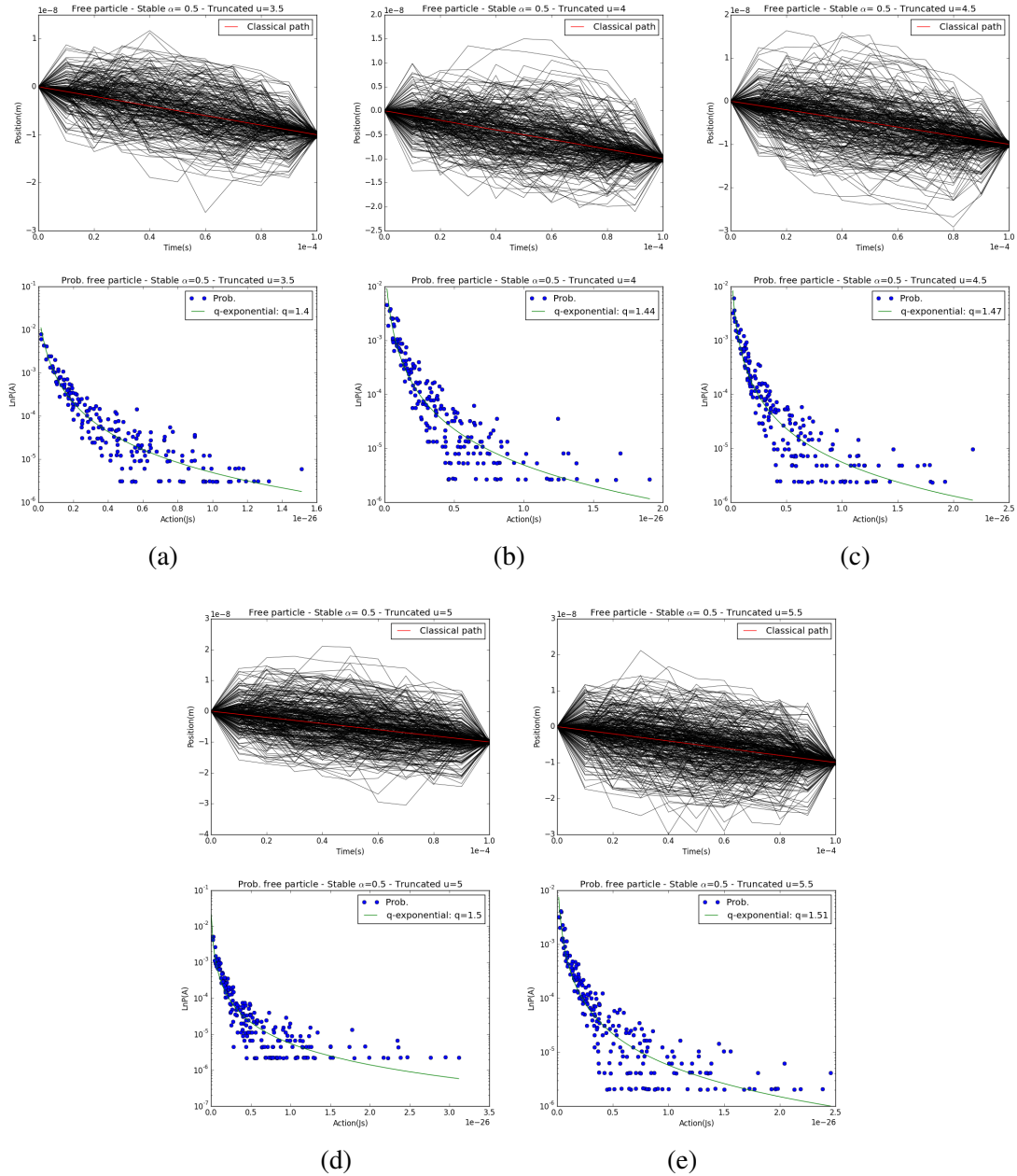
Figura 7.15 – Simulações com distribuição estável truncada, partículas livres e $\alpha = 1$.



Fonte: autor

- Simulações com distribuição de Lévy ($\alpha = 0.5$):

Figura 7.16 – Simulações com distribuição estável truncada, partículas livres e $\alpha = 0.5$.



Fonte: autor

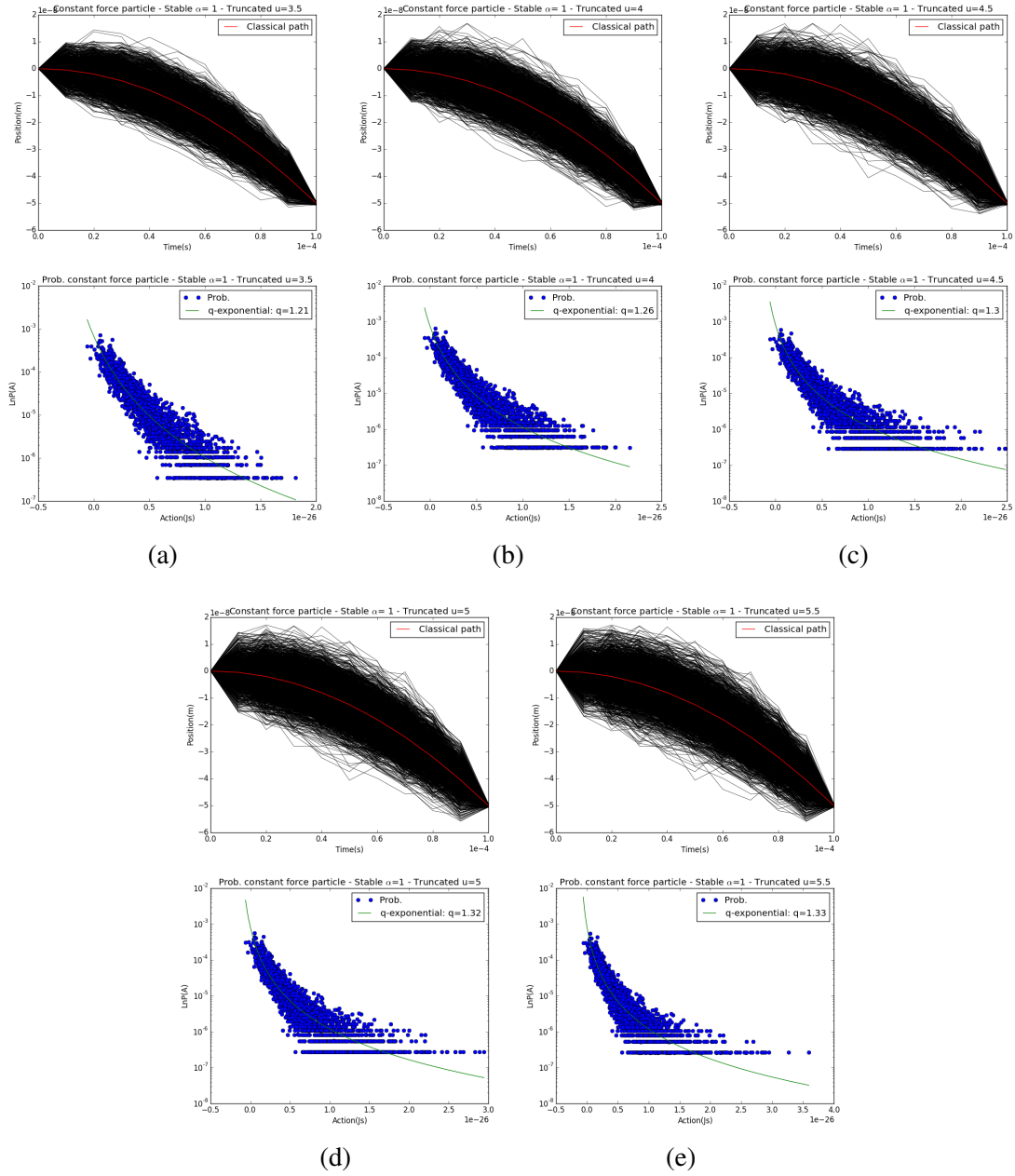
Tabela 7.6 – Resultados numéricos das simulações com partículas livres e distribuição de Cauchy e de Lévy truncadas.

u	$\alpha = 1$				$\alpha = 0,5$			
	q	q -erro	γ	γ -erro	q	q -erro	γ	γ -erro
3.5	1.254	0.008	-2.24×10^{27}	1.77×10^{26}	1.399	0.026	-7.82×10^{27}	3.27×10^{27}
4	1.290	0.008	-2.80×10^{27}	2.61×10^{26}	1.440	0.030	-1.16×10^{28}	7.59×10^{27}
4.5	1.338	0.008	-5.32×10^{27}	9.05×10^{26}	1.475	0.030	-1.673×10^{28}	1.40×10^{28}
5	1.343	0.007	-4.68×10^{27}	6.59×10^{26}	1.502	0.024	-1.63×10^{28}	1.03×10^{28}
5.5	1.370	0.007	-7.24×10^{27}	1.47×10^{27}	1.511	0.027	-1.67×10^{28}	1.33×10^{28}

7.3.2 Simulações para partículas sujeitas a uma força constante

- Simulações com distribuição de Cauchy ($\alpha = 1$):

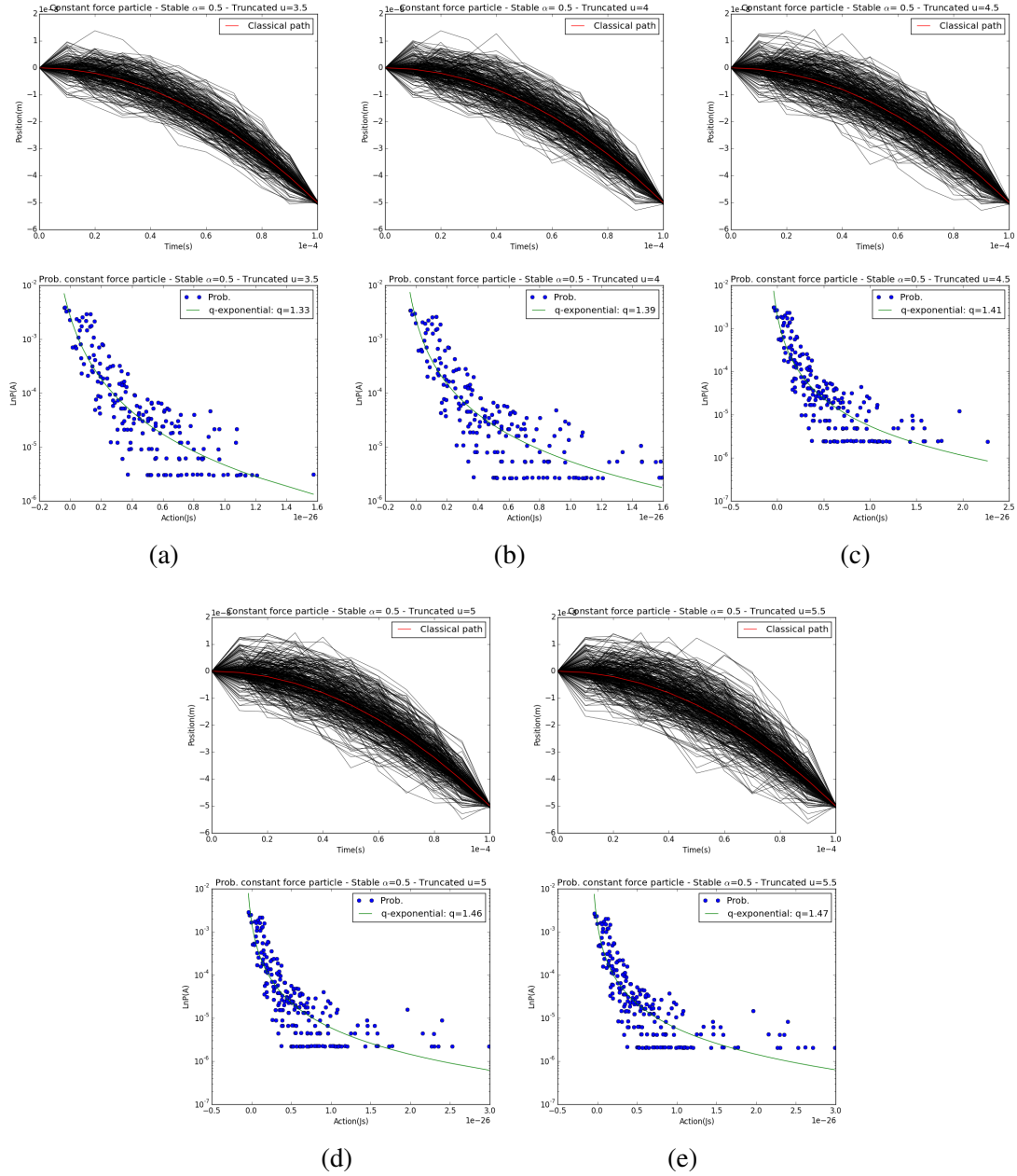
Figura 7.17 – Simulações com distribuição estável truncada, partículas em aceleração constante e $\alpha = 1$.



Fonte: autor

- Simulações com distribuição de Lévy ($\alpha = 0.5$):

Figura 7.18 – Simulações com distribuição estável truncada, partículas em aceleração constante e $\alpha = 0.5$.



Fonte: autor

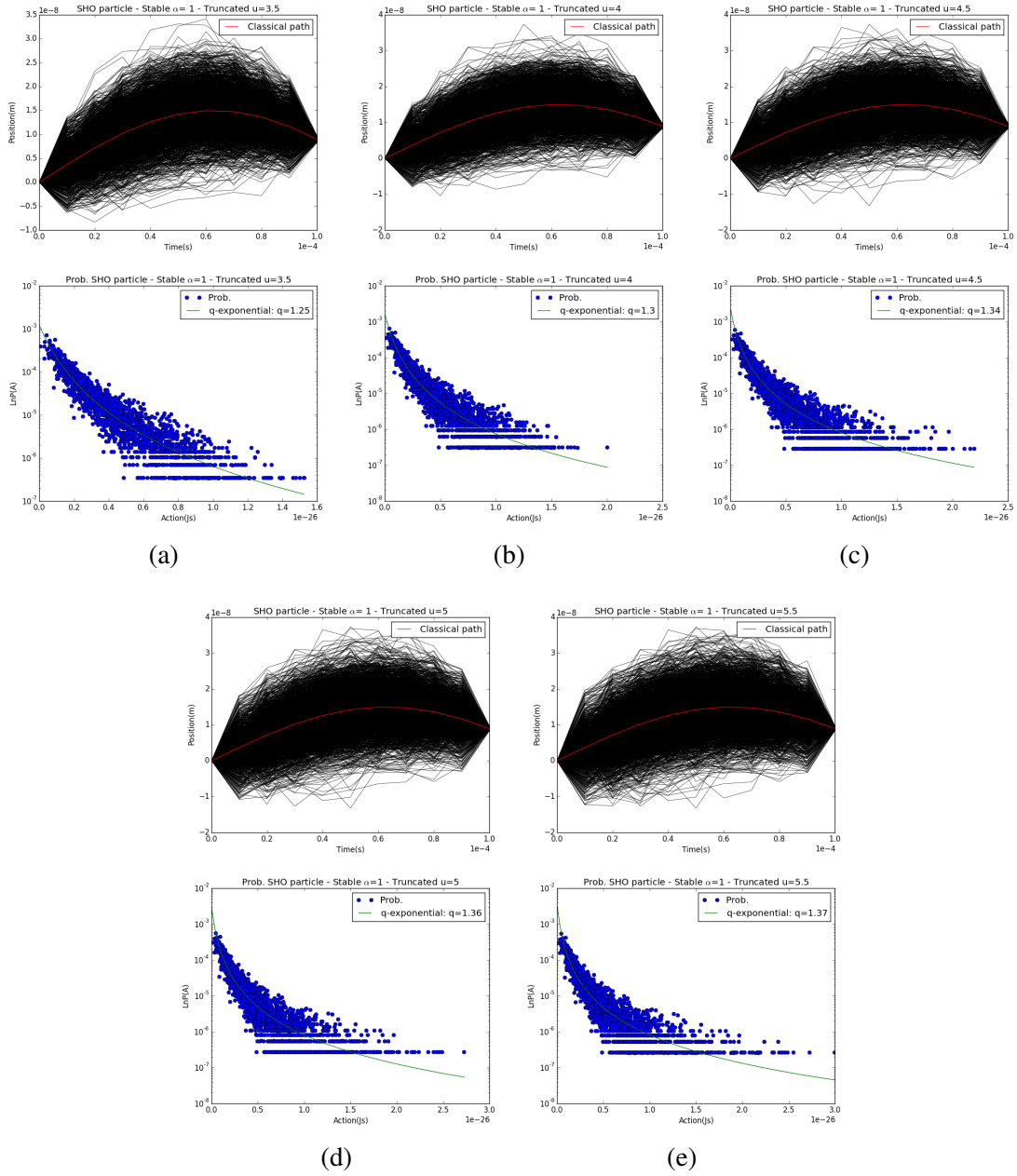
Tabela 7.7 – Resultados numéricos das simulações com partículas constantemente aceleradas e distribuição de Cauchy e de Lévy truncadas.

u	$\alpha = 1$				$\alpha = 0,5$			
	q	q -erro	γ	γ -erro	q	q -erro	γ	γ -erro
3.5	1.208	0.009	-1.36×10^{27}	8.64×10^{25}	1.326	0.039	-2.13×10^{27}	4.24×10^{27}
4	1.261	0.009	-1.69×10^{27}	1.21×10^{26}	1.385	0.037	-2.42×10^{27}	4.67×10^{27}
4.5	1.297	0.009	-2.00×10^{27}	1.54×10^{26}	1.413	0.035	-2.56×10^{27}	4.81×10^{27}
5	1.317	0.008	-2.20×10^{27}	1.75×10^{26}	1.464	0.034	-2.78×10^{27}	4.81×10^{27}
5.5	1.330	0.008	-2.35×10^{27}	1.89×10^{26}	1.475	0.034	-2.82×10^{27}	4.93×10^{27}

7.3.3 Simulações para partículas sujeitas a uma força restaurativa

- Simulações com distribuição de Cauchy ($\alpha = 1$):

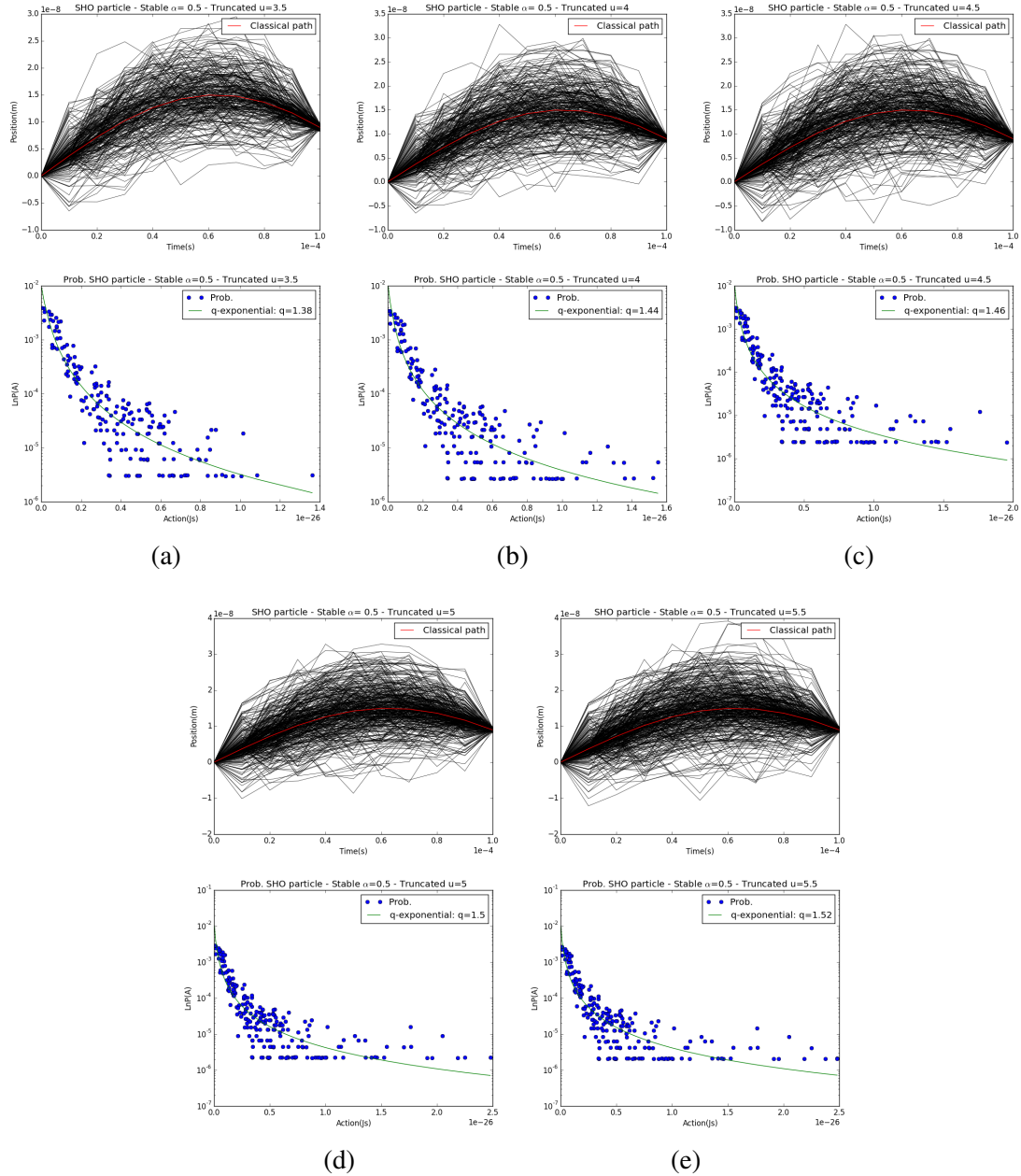
Figura 7.19 – Simulações com distribuição estável truncada, partículas em oscilação harmônica e $\alpha = 1$.



Fonte: autor

- Simulações com distribuição de Lévy ($\alpha = 0.5$):

Figura 7.20 – Simulações com distribuição estável truncada, partículas em oscilação harmônica constante e $\alpha = 0.5$.



Fonte: autor

Tabela 7.8 – Resultados numéricos das simulações com partículas em oscilação harmônica e distribuição de Cauchy e de Lévy truncadas.

u	$\alpha = 1$				$\alpha = 0.5$			
	q	q -erro	γ	γ -erro	q	q -erro	γ	γ -erro
3.5	1.245	0.010	-2.19×10^{27}	1.79×10^{26}	1.379	0.036	-5.40×10^{27}	1.84×10^{27}
4	1.300	0.009	-3.07×10^{27}	3.19×10^{26}	1.437	0.033	-7.39×10^{27}	2.96×10^{27}
4.5	1.338	0.009	-4.20×10^{27}	5.46×10^{26}	1.461	0.033	-8.58×10^{27}	3.73×10^{27}
5	1.358	0.008	-5.12×10^{27}	7.69×10^{26}	1.503	0.032	-1.13×10^{28}	5.74×10^{27}
5.5	1.370	0.008	-5.83×10^{27}	9.59×10^{26}	1.516	0.031	-1.22×10^{28}	6.54×10^{27}

Considerações

As probabilidades de trajetória com distribuições truncadas corroboram o resultado obtido para o PMAE com a distribuição de Tsallis. Além disso, podemos observar que os resultados possuem menor incerteza em relação ao parâmetro γ . Esta estratégia também é interessante pelo fato de podermos controlar o tamanho máximo absoluto dos deslocamentos randômicos.

7.4 Análise dos resultados

Examinando os resultados obtidos neste capítulo, podemos concluir que para descrever sistemas com possibilidade de ocorrência de eventos cisnes negros devemos considerar a entropia de Tsallis para a obtenção da distribuição de probabilidade de trajetória em função da ação.

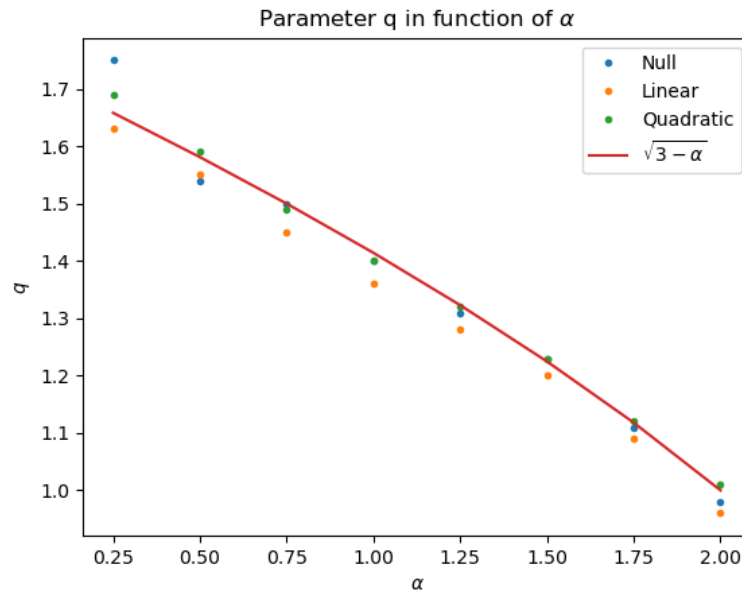
Quanto à utilização de vínculos, podemos perceber que os resultados também demonstram que os sistemas continuam obedecendo a probabilidade de trajetória prescrita pelo PMAE com a entropia de Tsallis. Além disso, podemos perceber que à medida que as restrições são relaxadas, o parâmetro q cresce. É importante salientar que para o uso do vínculo da energia das trajetórias a restrição não pode ser demasiadamente intensa, pois resulta na perda de correlação entre ação e probabilidade de trajetória devido à proximidade dos valores de ação das trajetórias. Para o procedimento de truncamento, nenhum tipo de restrição é necessária.

Analisando as simulações sem vínculos podemos observar que $q \propto \alpha$, quanto mais pesadas as caudas das distribuições, maior é o valor do parâmetro q . Além disso, essa relação parece ser bem definida, se plotamos o gráfico de $q \times \alpha$, podemos observar que existe uma correlação bem comportada desses parâmetros dada por

$$q = \sqrt{3 - \alpha}, \quad (7.5)$$

como apresentado na figura 7.21.

Figura 7.21 – Gráfico da relação entre q e α para as simulações de movimento randômico com diferentes potenciais.



Fonte: autor

Assim, podemos afirmar que à medida que α diminui, isto é, as caudas se tornam mais pesadas, os efeitos de interação à distância são mais intensos, uma vez que podemos interpretar $q - 1$ como uma medida das interações de longo alcance do sistema. Logo, a ocorrência de eventos tipo cisne negro está ligada às correlações à distância que um sistema possui.

8 CONCLUSÃO

O princípio da mínima ação pode ser estendido para a aplicação em sistemas estocásticos. A generalização estabelecida por meio da condição $\delta\bar{A} = 0$ é capaz de obter os vínculos necessários aos quais a probabilidade de trajetória de um sistema em movimento randômico deve estar sujeita. Tais vínculos são o valor esperado da ação ($\langle A \rangle$) e o vínculo de normalização das probabilidades ($\sum_i p_i = 1$), o vínculo natural. Utilizando destes vínculos e maximizando a entropia de Shannon, obtivemos a distribuição de probabilidade de trajetória com a forma $p_k(A_k) = \frac{e^{-\gamma A_k}}{Z}$; um análogo à distribuição termodinâmica de Boltzmann-Gibbs. Tomando o caso do movimento randômico com ruído gaussiano, elaboramos por meio da equação de Langevin simulações para verificar a probabilidade de trajetória obtida. Encontramos resultados que corroboram a probabilidade de trajetória definida teoricamente, mostrando assim a validade do PMAE no contexto de movimentos randômicos governados por distribuições gaussianas e sua equivalência com os resultados obtidos pelas integrais de trajetória.

Em busca de investigar a aplicação do PMAE para sistemas que possuem eventos tipo cisne negro (eventos raros e drásticos), modificamos a forma como os deslocamentos randômicos do processo estocástico são gerados para distribuições estáveis simétricas. As caudas destas distribuições podem ser controladas por meio de um parâmetro α que varia no intervalo $(0, 2]$, sendo $\alpha = 2$ a distribuição gaussiana e as caudas mais pesadas conforme $\alpha \rightarrow 0$. A existência destas caudas implica no aumento de probabilidade de ocorrência de eventos tipo cisne negro, uma vez que significam o aumento da probabilidade do eventos nos extremos da distribuição.

A modificação na forma como os eventos são gerados implica na modificação do tipo de difusão, de normal para anômala. A descrição macroscópica deste tipo de difusão é dada pela equação de Fokker-Planck com um operador diferencial fracionário, um operador não-local, o que resulta na existência de interações de longo alcance. Estas interações fazem com a que a entropia de Shannon não seja adequada para descrever o sistema, pois é uma condição da termodinâmica de Boltzmann-Gibbs que as interações sejam de curto alcance. Dessa maneira, em analogia com o processo difusivo, reobtemos a distribuição de probabilidade de trajetória utilizando a entropia de Tsallis, uma generalização da entropia de Shannon-Boltzmann-Gibbs adequada para sistemas com este tipo de interação.

Ao maximizarmos a entropia de Tsallis utilizando os vínculos para o PMAE obtemos a distribuição de probabilidade $p_k(k) = \frac{e_q^{-\gamma A_k}}{Z_q}$. Realizamos novas simulações variando o parâmetro α da distribuição estável e obtemos resultados que corroboram com a distribuição de

probabilidade de trajetória obtida teoricamente. Além disso, obtivemos uma relação entre o parâmetro q , utilizado para generalizar a entropia de Shannon e que mostra o nível de interações de longo alcance no sistema; e o parâmetro α que está relacionado com a intensidade e recorrência dos eventos tipo cisne negro, com a forma $q = \sqrt{3 - \alpha}$, mostrando que a intensidade de ocorrência de cisnes negros é proporcional às interações de longo alcance.

Os resultados acima apresentados na descrição de eventos cisnes negros são originais e podem ser utilizados em sistemas em que é possível obter uma descrição por meio de princípios variacionais com a generalização do conceito de ação. Alguns exemplos são o modelo de mercado financeiro de Black-Scholes (BLACK; SCHOLES, 1973; LINETSKY, 1997), modelos de biologia evolutiva (PEASE, 2011) e modelos de cadeias poliméricas (KLEINERT, 2009). Além disso, eles corroboram com a validade do PMAE e mostram que tal princípio é bastante abrangente, sendo capaz de descrever a dinâmica de processos estocásticos com comportamento diferente do gaussiano. A demonstração de que PMAE não é limitado ao tipo de movimento randômico do sistema também é importante pois, tal princípio, pode ser um caminho para abordar termodinâmica de não-equilíbrio (WANG; KAABOUCHIU, 2014) e a construção de um princípio da mínima ação para sistemas dissipativos (LIN et al., 2012).

REFERÊNCIAS

- ABE, S.; OKAMOTO, Y. **Nonextensive statistical mechanics and its applications**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2001.
- ANDERSON, J.; MORADI, S.; RAFIQ, T. Non-linear langevin and fractional fokker–planck equations for anomalous diffusion by lévy stable processes. **Entropy**, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 20, n. 10, p. 760, 2018.
- ANDERSON, S. C. et al. Black-swan events in animal populations. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, National Acad Sciences, v. 114, n. 12, p. 3252–3257, 2017.
- ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J. **Mathematical methods for physicists**. [S.l.]: American Association of Physics Teachers, 1999.
- BLACK, F.; SCHOLES, M. The pricing of options and corporate liabilities. **Journal of political economy**, The University of Chicago Press, v. 81, n. 3, p. 637–654, 1973.
- BOUNTIS, A.; VEERMAN, J.; VIVALDI, F. Cauchy distributions for the integrable standard map. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 384, n. 26, p. 126659, 2020.
- CASELLA, G.; BERGER, R. L. **Statistical inference**. [S.l.]: Duxbury Pacific Grove, CA, 2002. v. 2.
- CHAICHIAN, M.; DEMICHEV, A. **Path integrals in physics: Volume I stochastic processes and quantum mechanics**. [S.l.]: CRC Press, 2018.
- COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOË, F. **Quantum mechanics**. New York, NY: Wiley, 1977. Trans. of : Mécanique quantique. Paris : Hermann, 1973. Disponível em: <<https://cds.cern.ch/record/101367>>.
- DEVORE, J. L. **Probability and Statistics for Engineering and the Sciences**. [S.l.]: Cengage learning, 2011.
- EINSTEIN, A. On the theory of the Brownian movement. **Ann. Phys**, v. 19, n. 4, p. 371–381, 1906.
- FAMA, E. F.; ROLL, R. Some properties of symmetric stable distributions. **Journal of the American Statistical Association**, Taylor & Francis, v. 63, n. 323, p. 817–836, 1968.
- FEYNMAN, R. et al. Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics. **Space**, APS, v. 20, n. 2, 1948.
- FLORES, A. P. X. Cálculo variacional: aspectos teóricos e aplicações. Universidade Estadual Paulista (UNESP), 2011.
- GELL-MANN, M.; TSALLIS, C. **Nonextensive entropy: interdisciplinary applications**. [S.l.]: Oxford University Press, 2004.
- GHOSH, D. K. Classical Mechanics - Small Oscillations. URL: <https://bityli.com/qbORd>, 2016.
- GOLDSTEIN, H.; POOLE, C.; SAFKO, J. **Classical mechanics**. [S.l.]: American Association of Physics Teachers, 2002.

- GRIFFITHS, D. J. **Introduction to electrodynamics; 4th ed.** Boston, MA: Pearson, 2013.
- HILFER, R. **Applications of fractional calculus in physics.** [S.l.]: World scientific, 2000.
- HOBSON, M. P.; EFSTATHIOU, G. P.; LASENBY, A. N. **General relativity: an introduction for physicists.** [S.l.]: Cambridge University Press, 2006.
- HOUGH, S. E. **Predicting the unpredictable.** [S.l.]: Princeton University Press, 2009.
- IVANCEVIC, V. G.; IVANCEVIC, T. T. **Quantum leap: From Dirac and Feynman, across the universe, to human body and mind.** [S.l.]: World Scientific, 2008.
- JAYNES, E. T. Information theory and statistical mechanics. **Physical review**, APS, v. 106, n. 4, p. 620, 1957.
- KESAVAN, H. **Jaynes' Maximum Entropy Principle.** [S.l.]: Springer, 2009.
- KIPPING, D. Black swans in astronomical data. **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society**, Oxford University Press, v. 504, n. 3, p. 4054–4061, 2021.
- KLAGES, R.; RADONS, G.; SOKOLOV, I. **Anomalous Transport: Foundations and Applications.** Wiley, 2008. ISBN 9783527622986. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=N1xD7ay06Z4C>>.
- KLEINERT, H. Option pricing from path integral for non-Gaussian fluctuations. Natural martingale and application to truncated levy distributions. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 312, n. 1-2, p. 217–242, 2002.
- KLEINERT, H. **Path integrals in quantum mechanics, statistics, polymer physics, and financial markets.** [S.l.]: World scientific, 2009.
- KLEINERT, H. Quantum field theory of black-swan events. **Foundations of physics**, Springer, v. 44, n. 5, p. 546–556, 2014.
- LANDSBERG, P. T. **Thermodynamics and statistical mechanics.** [S.l.]: Oxford University Press, 1978.
- LASKIN, N. Fractional quantum mechanics. **Physical Review E**, APS, v. 62, n. 3, p. 3135, 2000.
- LENZI, E. et al. Anomalous diffusion, nonlinear fractional fokker–planck equation and solutions. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 319, p. 245–252, 2003.
- LIMA, G. M. B. d. Processos aleatórios não-markovianos: perfis de memória. Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 2013.
- LIN, T. **Path probability and an extension of least action principle to random motion.** Tese (Doutorado) — Le Mans, 2013.
- LIN, T. et al. Numerical study of path probability for stochastic motion of non dissipative systems. **arXiv preprint arXiv:1202.0924**, 2012.
- LINETSKY, V. The path integral approach to financial modeling and options pricing. **Computational Economics**, Springer, v. 11, n. 1-2, p. 129–163, 1997.

MAJHI, A. Non-extensive statistical mechanics and black hole entropy from quantum geometry. **Physics Letters B**, Elsevier, v. 775, p. 32–36, 2017.

MARION, J. B. **Classical Dynamics of particles and systems**. [S.l.]: Academic Press, 2013.

MAZO, R. M. **Brownian motion: fluctuations, dynamics, and applications**. [S.l.]: Oxford University Press on Demand, 2002.

METZLER, R.; KLAFTER, J. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach. **Physics reports**, Elsevier, v. 339, n. 1, p. 1–77, 2000.

METZLER, R.; KLAFTER, J. The restaurant at the end of the random walk: recent developments in the description of anomalous transport by fractional dynamics. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, IOP Publishing, v. 37, n. 31, p. R161, 2004.

MONTGOMERY, D.; RUNGER, G. **Applied Statistics and Probability for Engineers**. John Wiley & Sons Incorporated, 2005. ISBN 9780471788652. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=EVLvPgAACAAJ>>.

MOREIRA, I. C. Maupertuis 1698-1759 e o Princípio da Mínima Ação. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 21, n. 1, 1999.

MUTHUKRISHNA, D.; LOCHNER, M.; WEBB, S. Real-time detection of anomalies in large-scale transient surveys. 2019.

NETO, J. B. **Mecânica Newtoniana, Lagrangiana e Hamiltoniana**. [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2004.

NEWS, B. **Vulcão em erupção nas Canárias: por que é baixo o risco de tsunami no Brasil**. 2021. Disponível em: <<https://epocanegocios.globo.com/Um-So-Planeta/noticia/2021/09/vulcao-em-erupcao-nas-canarias-por-que-e-baixo-o-risco-de-tsunami-no-brasil.html>>.

NOLAN, J. **Univariate Stable Distributions: Models for Heavy Tailed Data**. Springer International Publishing, 2020. (Springer Series in Operations Research and Financial Engineering). ISBN 9783030529154. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=c7r8DwAAQBAJ>>.

NUSSENZVEIG, H. M. **Curso de física básica: Mecânica (vol. 1)**. [S.l.]: Editora Blucher, 2013. v. 394.

OLIVEIRA, M. J. de. **Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade Vol. 35**. [S.l.]: EdUSP, 2001.

PARADISI, P. et al. The fractional fick's law for non-local transport processes. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 293, n. 1-2, p. 130–142, 2001.

PASSOS, E. **Como Romain Grosjean sobreviveu ao inferno no GP do Bahrein?** 2020. Disponível em: <<https://quatorrodas.abril.com.br/noticias/como-romain-grosjean-sobreviveu-ao-inferno-no-gp-do-bahrein/>>.

PEARSON, K. “Das fehlergesetz und seine verallgemeinerungen durch Fechner und Pearson.” a rejoinder. **Biometrika**, Oxford University Press, v. 4, n. 1-2, p. 169–212, 1905.

PEARSON, K.; LEE, A. On the laws of inheritance in man: I. Inheritance of physical characters. **Biometrika**, JSTOR, v. 2, n. 4, p. 357–462, 1903.

- PEASE, A. QIB: Connecting Feynman Path Integrals to Biophysical Problems. 2011.
- PEDRON, I. T.; MENDES, R. d. S. Difusao anômala e equações generalizadas de difusao. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, SciELO Brasil, v. 27, n. 2, p. 251–258, 2005.
- PLASTINO, A.; PLASTINO, A. Non-extensive statistical mechanics and generalized fokker-planck equation. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 222, n. 1-4, p. 347–354, 1995.
- PREHL, J.; ESSEX, C.; HOFFMANN, K. H. Tsallis relative entropy and anomalous diffusion. **Entropy**, Molecular Diversity Preservation International, v. 14, n. 4, p. 701–716, 2012.
- SALINAS, S. R. **Introdução a física estatística vol. 09**. [S.l.]: Edusp, 1997.
- SANTOS, L. Microscopic dynamics of nonlinear fokker-planck equations. **Physical Review E**, APS, v. 103, n. 3, p. 032106, 2021.
- SANTOS, R. J. dos. Generalization of shannon's theorem for tsallis entropy. **Journal of Mathematical Physics**, American Institute of Physics, v. 38, n. 8, p. 4104–4107, 1997.
- SHANNON, C. E. A mathematical theory of communication. **The Bell system technical journal**, Nokia Bell Labs, v. 27, n. 3, p. 379–423, 1948.
- SREDNICKI, M. **Quantum field theory**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2007.
- TALEB, N. N. **The black swan: The impact of the highly improbable**. [S.l.]: Random house, 2007. v. 2.
- TAYLOR, J. R. **Classical mechanics**. [S.l.]: University Science Books, 2005.
- TSALLIS, C. Possible generalization of boltzmann-gibbs statistics. **Journal of statistical physics**, Springer, v. 52, n. 1, p. 479–487, 1988.
- TSALLIS, C. Some comments on boltzmann-gibbs statistical mechanics. **Chaos, Solitons & Fractals**, Elsevier, v. 6, p. 539–559, 1995.
- TSALLIS, C. Nonadditive entropy: The concept and its use. **The European Physical Journal A**, Springer, v. 40, n. 3, p. 257–266, 2009.
- TSALLIS, C. Mecânica estatística de sistemas complexos. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, SciELO Brasil, v. 43, 2021.
- TSALLIS, C.; BUKMAN, D. J. Anomalous diffusion in the presence of external forces: Exact time-dependent solutions and their thermostistical basis. **Physical Review E**, APS, v. 54, n. 3, p. R2197, 1996.
- TSALLIS, C.; LENZI, E. Anomalous diffusion: nonlinear fractional fokker-planck equation. **Chemical Physics**, Elsevier, v. 284, n. 1-2, p. 341–347, 2002.
- TSALLIS, C. et al. Statistical-mechanical foundation of the ubiquity of lévy distributions in nature. **Physical Review Letters**, APS, v. 75, n. 20, p. 3589, 1995.
- TSALLIS, C.; MENDES, R.; PLASTINO, A. R. The role of constraints within generalized nonextensive statistics. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 261, n. 3-4, p. 534–554, 1998.

TSALLIS, C.; SOUZA, A. M. de; MAYNARD, R. Derivation of lévy-type anomalous superdiffusion from generalized statistical mechanics. In: **Lévy flights and related topics in Physics**. [S.l.]: Springer, 1995. p. 269–289.

WANG, Q. A. A probabilistic mechanics theory for random dynamics. **arXiv preprint arXiv:1002.4026**, 2010.

WANG, Q. A. A probabilistic mechanics theory for random dynamics. **arXiv preprint arXiv:1002.4026**, 2010.

WANG, Q. A.; KAABOUCIU, A. E. From random motion of hamiltonian systems to boltzmann's h theorem and second law of thermodynamics: a pathway by path probability. **Entropy**, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 16, n. 2, p. 885–894, 2014.

WARD, S. N.; DAY, S. Cumbre vieja volcano—potential collapse and tsunami at la palma, canary islands. **Geophysical Research Letters**, Wiley Online Library, v. 28, n. 17, p. 3397–3400, 2001.

WEATHERALL, J. O. **The physics of wall street: a brief history of predicting the unpredictable**. [S.l.]: Houghton Mifflin Harcourt, 2013.

WIENER, N. The average of an analytic functional. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, National Academy of Sciences, v. 7, n. 9, p. 253, 1921.

XIAO, D. et al. Innovation for measuring the distribution function with nonextensive single electric probe. **AIP Advances**, AIP Publishing LLC, v. 11, n. 8, p. 085228, 2021.

ZIA, R. K.; REDISH, E. F.; MCKAY, S. R. Making sense of the legendre transform. **American Journal of Physics**, American Association of Physics Teachers, v. 77, n. 7, p. 614–622, 2009.

APÊNDICE A – Transformação de Legendre

A transformação de Legendre é uma importante ferramenta matemática que utilizamos na física (ZIA; REDISH; MCKAY, 2009). No contexto da termodinâmica e da mecânica estatística a utilizamos para relacionar a energia de um sistema com os potenciais termodinâmicos. Por sua vez, no contexto da mecânica clássica, é usada para relacionar a hamiltoniana com a lagrangiana.

Uma transformação de Legendre é uma maneira de obter uma nova função escrita em termos da derivada da função original. Essa nova função é obtida porque com ela temos as mesmas informações da função original¹, porém, em um dado contexto, pode ser uma função mais conveniente de se trabalhar.

Para construir uma transformação de Legendre devemos obedecer o seguinte procedimento: se temos uma função original, $O(x)$, precisamos que ela satisfaça as condições $\frac{d^2O}{dx^2} > 0$ e $\frac{d^n O}{dx^n} \neq 0$ existente para qualquer n natural. Vamos agora definir a nova variável, na qual a função transformada (T) será escrita: a inclinação da curva $O(x)$,

$$a(x) = \frac{dO}{dx}. \quad (1)$$

É necessário que $a(x)$ seja inversível, uma vez que iremos escrever $O(x(a))$. De posse dessas informações, temos a definição da transformação de Legendre como

$$T(a) = a(x)x - O(x(a)). \quad (2)$$

O sinal negativo é justificado pelo fato de que a inclinação da função transformada deve ser a própria variável que tínhamos previamente, ou seja, $\frac{dT}{da} = x$. Como podemos verificar explicitamente:

$$\begin{aligned} \frac{d}{da}T(a) &= \frac{d}{da}(a(x)x) - \frac{d}{da}(O(x(a))) \\ \frac{d}{da}T(a) &= x. \end{aligned} \quad (3)$$

A imposição de que $\frac{dT}{da} = x$ nos conduz a uma relação de simetria da transformação de Legendre. Para compreender de maneira clara essa simetria, vamos realizar agora a transformação de Legendre na função $T(a)$. Definimos uma nova variável $b(a) = \frac{dT}{da}$. Utilizando (2),

¹ As quantidades conservadas e simetrias são preservadas.

encontramos

$$R(b) = ab(a) - T(a(b)), \quad (4)$$

mas utilizando a imposição (3),

$$R(x) = ax(a) - T(a(x)), \quad (5)$$

que pode ser reorganizado em

$$T(a(x)) = ax(a) - R(x). \quad (6)$$

Logo, se comparamos (6) com (2) chegamos à conclusão de que

$$R(x) = O(x), \quad (7)$$

ou seja, a transformação de Legendre aplicada em uma função que foi obtida por meio de uma transformação de Legendre nos devolve a função original; a transformação de Legendre é a sua própria inversa. Podemos escrever a transformação de Legendre (2) como

$$T(a(x)) + O(x(a)) = x(a)a(x). \quad (8)$$

Concluimos, portanto, que a inversa de uma transformação de Legendre é também uma transformação de Legendre. Por meio dessa simetria, podemos obter sucessivas relações entre $O(x)$ e $T(a)$. Para obtê-las, utilizamos as definições $a = \frac{dO}{dx}$ e $x = \frac{dT}{da}$, derivamos a primeira em relação a x e a segunda em relação a a , e substituímos os resultados em $\frac{da}{dx} \frac{dx}{da} = 1$, o que implica em

$$\frac{d^2O}{dx^2} \frac{d^2T}{da^2} = 1, \quad (9)$$

podemos seguir diferenciando essa equação para obter relações entre derivadas de maior grau entre O e T . Observe que essa equação nos diz que a concavidade de O e T são inversamente proporcionais.

Na mecânica clássica

Aplicando a transformação de Legendre na lagrangiana $\mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i, t)$, e desejando eliminar as variáveis $\dot{q}_i$, devemos definir

$$x_i(\dot{q}_i) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}. \quad (10)$$

Por meio da definição da transformação de Legendre (2), temos

$$\mathcal{H}(q_i, x_i, t) = \dot{q}_i x_i - \mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i(x_i), t). \quad (11)$$

Utilizando a definição do momento generalizado (2.15) identificamos $x_i = p_i$, logo

$$\mathcal{H}(q_i, x_i, t) = \dot{q}_i p_i - \mathcal{L}(q_i, p_i, t), \quad (12)$$

que é a definição da hamiltoniana.

APÊNDICE B – A generalização da integral gaussiana

Podemos obter uma relação de generalização da integral gaussiana com a função gama (Γ), que é uma função fatorial. Em termos da notação fatorial a função gama é escrita como

$$\Gamma(z) = (z-1)!, \quad (13)$$

porém essa definição só é aplicável para valores inteiros de z . Uma definição da função gama válida para valores inteiros ou não de z é dada por

$$\Gamma(z) = \int_0^{+\infty} e^{-t} t^{z-1} dt, \quad (14)$$

chamada integral de Euler (ARFKEN; WEBER, 1999).

Utilizando do fato de e^{-x^2} ser uma função par podemos escrever a integral gaussiana como

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = 2 \int_0^{+\infty} e^{-x^2} dx. \quad (15)$$

Fazemos uma mudança de variáveis do tipo $x^2 = t$ na integral acima. Assim, $dx = \frac{1}{2} t^{-\frac{1}{2}} dt$, logo

$$2 \int_0^{+\infty} e^{-x^2} dx = 2 \int_0^{+\infty} e^{-t} \frac{1}{2} t^{-\frac{1}{2}} dt = \int_0^{+\infty} e^{-t} t^{-\frac{1}{2}} dt. \quad (16)$$

Assim, podemos verificar que integral gaussiana é um caso particular da função gama (Γ), mais especificamente para $\Gamma(\frac{1}{2})$.

Para a aplicação que apresentamos na seção 3.4.1 é interessante obter uma relação mais geral na forma que se segue. Para isso, tomamos

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax^b} dx, \quad (17)$$

fazemos a substituição $t = ax^b$ em (14). Sendo $dt = bax^{(b-1)} dx$

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt &= \int_0^{\infty} e^{-ax^b} (ax^b)^{z-1} bax^{(b-1)} dx \\ &= a^z b \int_0^{\infty} x^{bz-1} e^{-ax^b} dx, \end{aligned} \quad (18)$$

se identificamos $bz - 1 = n$, temos

$$\int_0^\infty x^n e^{-ax^b} = \frac{1}{a^{\frac{n+1}{b}} b} \Gamma\left(\frac{n+1}{b}\right). \quad (19)$$

É importante ressaltar que o resultado acima é válido para valores em que n é par, uma vez que para valores ímpares a integral será imediatamente nula por uma questão de simetria. O parâmetro a deve ser positivo e b múltiplo de dois.