



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA – CCEN  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

**HERMES ALFREDO VELÁZQUEZ URQUIJO**

**PRODUÇÃO DE ENTROPIA EM PROCESSOS ESTOCÁSTICOS HIERÁRQUICOS**

Recife  
2019

**HERMES ALFREDO VELÁZQUEZ URQUIJO**

**PRODUÇÃO DE ENTROPIA EM PROCESSOS ESTOCÁSTICOS HIERÁRQUICOS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Área de Concentração: Física Teórica e Computacional

Orientador: Prof. Antônio Murilo Santos Macêdo

Recife  
2019

Catálogo na fonte  
Bibliotecária Mariana de Souza Alves CRB4-2105

U79p Urquijo, Hermes Alfredo Velázquez.  
Produção de entropia em processos estocásticos hierárquicos / Hermes Alfredo  
Velázquez Urquijo. – 2019.  
65 f.: il., fig.

Orientador: Antônio Murilo Santos Macêdo.  
Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN, Física.  
Recife, 2019.  
Inclui referências e apêndice.

1. Física Teórica e Computacional. 2. Sistemas hierárquicos. 3. Teoria H. 4.  
Equação mestra. I. Macêdo, Antônio Murilo Santos (orientador). II. Título.

530.1

CDD (22. ed.)

UFPE-CCEN 2020-138

**HERMES ALFREDO VELÁZQUEZ URQUIJO**

**PRODUÇÃO DE ENTROPIA EM PROCESSOS ESTOCÁSTICOS HIERÁRQUICOS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Aprovada em: 10/05/2019.

**BANCA EXAMINADORA**

---

Prof. Antônio Murilo Santos Macêdo  
Orientador  
Universidade Federal de Pernambuco

---

Prof. Leonardo de Souza Menezes  
Examinador Interno  
Universidade Federal de Pernambuco

---

Prof. Anderson Luiz da Rocha e Barbosa  
Examinador Externo  
Universidade Federal Rural de Pernambuco

## AGRADECIMENTOS

Ao meu orientador A. Murilo pela paciência e dedicação na orientação deste trabalho.

A todas as pessoas que indiretamente ajudaram na realização deste trabalho me apoiando monetária, física e emocionalmente, destacando:

- Minha família.
- Minha amiga e colega de quarto Márcia Frómeta.
- Minha noiva Rosália Oliveira.
- Meus amigos e colegas de quarto Guillermo Palacios e Miguel.
- Colega de estudo durante as disciplinas Alexandre Andrade.
- Professores do Departamento de Física da UFPE e da Universidade de Oriente em Cuba pela formação.

À agência financiadora CNPq pelo suporte financeiro.

## RESUMO

Nesta dissertação, estudamos algumas propriedades da termodinâmica estocástica de não equilíbrio de sistemas complexos hierárquicos no contexto da versão discreta da teoria H. A versão contínua da teoria H foi recentemente proposta na forma de um conjunto de equações diferenciais estocásticas acopladas, cujos elementos principais (o termo de deriva e o de ruído) são modelados de forma a satisfazer os critérios da teoria estatística da turbulência em fluidos de Kolmogorov. Na versão discreta da teoria H, as distribuições são obtidas através de uma hierarquia de processos estocásticos ligados ao teorema central do limite. Concentramos esforços na descrição dinâmica dos dois primeiros membros da hierarquia, que correspondem aos processos de Poisson e binomial negativo, respectivamente. Esta tarefa foi realizada através do método de Baez para representação hamiltoniana de equações mestras de processos estocásticos. As equações mestras foram resolvidas analiticamente para todas as escalas temporais. Com os coeficientes da equação mestra é possível obter os elementos da matriz de taxas que juntamente com a solução analítica da distribuição nos permitiu fazer uma descrição completa da termodinâmica estocástica de cada processo, com ênfase na produção de entropia. Finalmente, introduzimos uma aproximação do tipo Born-Oppenheimer para extrapolar ao regime dinâmico a relação existente entre as distribuições estacionárias da teoria H nos casos em que há grande separação de escalas temporais. Mostramos para o processo binomial negativo que a aproximação Born-Oppenheimer produz uma solução aproximada para a dinâmica que se torna exata no equilíbrio. Extensões para os membros restantes da hierarquia são discutidos nas conclusões.

**Palavras-chave:** Sistemas hierárquicos. Teoria H. Equação mestra. Aproximação Born-Oppenheimer.

## ABSTRACT

In this work, we study some properties of stochastic non-equilibrium thermodynamics of complex hierarchical systems in the context of the discrete version of H theory. The continuous version of H-theory has recently been proposed in form of a set of coupled stochastic differential equations whose main elements (the drift and noise terms) are modeled to meet the criteria of Kolmogorov's statistical theory of turbulence in fluids. In the discrete version of H-theory, distributions are obtained through a hierarchy of stochastic processes associated with the central limit theorem. We focus on a dynamical description of the first two members of the hierarchy, which correspond to the Poisson and the negative binomial processes respectively. This task was performed through the Baez method for Hamiltonian representation of the master equations of stochastic processes. The master equations were solved analytically for all time scales. With the coefficients of the master equation it is possible to obtain the elements of the rate matrix which together with the analytical solution of the distribution allowed us to make a complete description of the stochastic thermodynamics of each process, with emphasis on the production of entropy. Finally, we introduce a Born-Oppenheimer approximation to extrapolate to the dynamic regime the relation between the H-stationary distributions in cases where there is a large separation of time scales. We show for the negative binomial process that the Born-Oppenheimer approximation produces an approximate solution to the dynamics that becomes accurate in equilibrium. Extensions to the remaining members of the hierarchy are discussed in the conclusions.

**Keywords:** Hierarchical systems. H-theory. Master equation. Born-Oppenheimer approximation.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1	– Representação diagramática das interações e espécies no método de Baez. . . . .	27
Figura 2	– Diagramas de Petri de dois processos unidirecionais (itens a e b) e um processo bidirecional (item c). . . . .	28
Figura 3	– Diagrama de Petri de um processo de Poisson. O bloco T1 representa a transição e o círculo a espécie $n$ . . . . .	37
Figura 4	– Representação dinâmica do processo de Poisson. . . . .	38
Figura 5	– Evolução temporal do processo de Poisson, em unidades arbitrárias de tempo para $\alpha = 0.9$ . . . . .	39
Figura 6	– Diagramas equivalentes de Petri do processo binomial negativo. . . . .	43
Figura 7	– Representação dinâmica do processo Binomial Negativo. . . . .	44
Figura 8	– Probabilidades do processo BN em unidades de tempo arbitrárias para os 4 primeiros valores de $n$ . Valores do parâmetros escolhidos: $\alpha = 0.3$ , $\beta = 0.1$ e $\nu = 3$ . . . . .	48
Figura 9	– Comparação entre as soluções obtidas do processo BN no equilíbrio e a distribuição dinâmica BN para valores diferentes de $n$ e $t \gg 1$ ( $\alpha = 0.3$ , $\beta = 0.1$ e $\nu = 3$ ). . . . .	49
Figura 10	– Comparação entre o processo BN e o valor da distribuição estacionária em $n = 0$ . . . . .	49
Figura 11	– Gráfico das taxas de variação de entropia em um processo BN com parâmetros $\alpha = 0.3$ , $\beta = 0.1$ e $\nu = 3$ . Como prediz a termodinâmica estocástica, temos dois comportamentos dos termos da taxa de variação da entropia total, um sempre maior que zero ( $\Pi(t)$ ) e outro que poderia ter qualquer sinal ( $\Phi(t)$ ), mas que é sempre menor que zero no processo BN. . . . .	54
Figura 12	– Se pode apreciar neste gráfico como a entropia achada cumpre com o teorema de flutuação-dissipação. . . . .	55
Figura 13	– Os gráficos mostram a energia e número médio de osciladores no primeiro estado excitado respondendo ao processo de Poisson (primeira coluna) e ao processo BN (segunda coluna). . . . .	56
Figura 14	– Modelo hierárquico de um sistema com dois subsistemas. A versão discreta da teoria H leva a uma distribuição BN no equilíbrio. Note que enquanto um sistema faz o papel de reservatório com um fluxo de probabilidade negativo, o subsistema interior percebe fluxo nos dois sentidos. . . . .	58
Figura 15	– Comparação das soluções exata (em azul, linhas descontínuas) e a aproximação (em vermelho, linha contínua) em função do tempo. Parâmetros: $\alpha = 0.3$ , $\beta = 0.1$ . . . . .	60

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b> . . . . .	<b>10</b>
1.1	A TEORIA H . . . . .	11
1.2	PRODUÇÃO DE ENTROPIA EM PROCESSOS ESTOCÁSTICOS . . . . .	12
1.3	OBJETIVOS DA DISSERTAÇÃO . . . . .	13
<b>2</b>	<b>FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA</b> . . . . .	<b>14</b>
2.1	SISTEMAS DE PROBABILIDADE ESTATÍSTICA . . . . .	15
<b>2.1.1</b>	<b>Sistema bayesiano de Jaynes</b> . . . . .	<b>16</b>
<b>2.1.2</b>	<b>Sistema de Kolmogorov</b> . . . . .	<b>18</b>
<b>2.1.3</b>	<b>Processos estocásticos</b> . . . . .	<b>21</b>
2.1.3.1	Axiomas de Kolmogorov . . . . .	21
<b>2.1.4</b>	<b>Processos de Markov e processos de salto</b> . . . . .	<b>23</b>
2.1.4.1	Equação de Chapman-Kolmogorov . . . . .	24
2.1.4.2	Equação mestra . . . . .	24
<b>2.1.5</b>	<b>Método de Baez para processos de salto</b> . . . . .	<b>26</b>
2.2	PRODUÇÃO DE ENTROPIA EM PROCESSOS ESTOCÁSTICOS . . . . .	29
2.3	CONEXÃO ENTRE A TEORIA H E PROCESSOS ESTOCÁSTICOS DIS- CRETOS . . . . .	32
<b>3</b>	<b>PRODUÇÃO DE ENTROPIA EM PROCESSOS DE MARKOV</b> . . . . .	<b>36</b>
3.1	PROCESSO DE POISSON . . . . .	37
<b>3.1.1</b>	<b>Representação matricial da equação mestra</b> . . . . .	<b>40</b>
3.2	PROCESSO BINOMIAL NEGATIVO . . . . .	41
<b>3.2.1</b>	<b>Função geradora do processo BN</b> . . . . .	<b>44</b>
3.2.1.1	Probabilidade do processo BN . . . . .	47
3.2.1.2	Análise dos valores limites . . . . .	48
<b>3.2.2</b>	<b>Representação matricial do processo BN</b> . . . . .	<b>50</b>
3.3	ANÁLISE TERMODINÂMICA . . . . .	53
<b>3.3.1</b>	<b>Aproximação de Born-Oppenheimer</b> . . . . .	<b>55</b>
<b>4</b>	<b>CONCLUSÕES</b> . . . . .	<b>61</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b> . . . . .	<b>63</b>
	<b>APÊNDICE A – LIMITE DAS SOMAS</b> . . . . .	<b>66</b>

## 1 INTRODUÇÃO

A estatística é um instrumento bastante eficaz para analisar sistemas físicos através de ferramentas que operam diretamente nos dados experimentais, tais como os valores médios de observáveis macroscópicos e suas respectivas variâncias, as quais muitas vezes fornecem informação suficientemente precisa para uma descrição essencialmente completa do comportamento global do sistema. Do ponto de vista prático, a informação estatística é obtida com custos computacionais relativamente baixos em comparação com uma abordagem microscópica direta via mecânica clássica, por exemplo. No entanto, a estatística é mais que um mero instrumento matemático, visto que problemas como a emergência da irreversibilidade em sistemas físicos indicam a existência de leis de natureza estatística em sistemas de muitas partículas, ou seja leis que emergem à medida em que o número de partículas aumenta. Em consequência, fenômenos emergentes não poderiam ser obtidos com o simples conhecimento das variáveis dinâmicas de todas as partículas que formam o sistema, visto que eles, em princípio, não derivam de leis microscópicas. Vale ressaltar que este ponto de vista, denominado emergentista, apesar de dominante hoje em dia, contrasta frontalmente com a visão tradicional reducionista da física. A mecânica quântica foi, provavelmente, a teoria que mais acrescentou ingredientes a esta corrente de pensamento, uma vez que a natureza intrinsecamente probabilística dos sistemas mecânico-quânticos é inegável, tendo em vista os resultados experimentais. Isto acabou levando a uma revolução filosófica que pôs em questionamento conceitos como determinismo, localidade e até mesmo a própria existência de uma realidade física independente.

A necessidade de entender a dinâmica de sistemas físicos cada vez mais complexos levou ao surgimento da física estocástica. Um dos primeiros problemas resolvidos por esta abordagem foi o movimento browniano (PITMAN; YOR, 2018), observado por Robert Brown em 1827 e descrito matematicamente por Albert Einstein em 1905. Desde então, o movimento browniano tornou-se um paradigma que demonstrou a importância da dinâmica estocástica no estudo de sistemas físicos complexos. O método de Einstein para descrever coletivamente, através da evolução temporal de uma distribuição de probabilidade, o conjunto de trajetórias estocásticas dos grãos de pólen em movimento browniano evoluiu para uma abordagem geral baseada em equações diferenciais parciais para a distribuição de probabilidade: as equações de Fokker-Planck. Por outro lado, os estudos de Andrei Kolmogorov (YOUSCHKEVITCH, 1983) deram o contexto matemático apropriado para a formulação geral da mecânica estatística de não equilíbrio, que tem como objetivo geral descrever quantitativamente a dinâmica estocástica de sistemas físicos complexos, tendo o problema do movimento browniano como um caso particular. A abordagem de Kolmogorov utiliza como base estruturas fundamentais da matemática, como sigma-álgebras e a teoria da medida, para propor os axiomas básicos da teoria de processos estocásticos (GARDINER, 2004). Seguindo ideias de Kolmogorov pode-se chegar, após as devidas aproximações, tanto nas equações de Fokker-Planck para variáveis estocásticas contínuas

quanto na equação mestra, no caso de variáveis estocásticas discretas.

Matematicamente, a equação mestra é uma coleção de equações diferenciais recursivas baseadas na condição de Markov, ou seja elas representam processos markovianos ou processos que não apresentam memória. Em outras palavras, com a equação mestra podemos calcular a probabilidade de um evento condicionada apenas ao evento mais recente, que ocorreu no passo anterior do processo estocástico. Por ser uma equação diferencial no tempo, a solução da equação mestra é uma probabilidade dependente do tempo, o que torna possível analisar a dinâmica do sistema fora do equilíbrio. Em sistemas fora do equilíbrio, fenômenos novos interessantes podem acontecer, por exemplo, enquanto a entropia de um sistema em equilíbrio é sempre máxima, em processos de não-equilíbrio pode haver micro-sistemas onde a entropia pode decrescer. Isto não constitui, em si, uma violação da segunda lei da termodinâmica, visto que a entropia total do sistema+ambiente não decresce, mas permite o controle do sistema por mecanismos como “feedback” ou “demônios de Maxwell” (ESPOSITO; SCHALLER, 2012). Alguns sistemas biológicos chamados de “motores químicos” utilizam mecanismos similares para ampliar a eficiência com que trabalham (BOKSENBOJM; WYNANTS, 2009). Sistemas fora do equilíbrio são estudados para resolver problemas em áreas como óptica quântica, turbulência em fluidos, física nuclear, biologia e química, apenas para mencionar alguns exemplos (ENGLERT, 1993)(ENGLERT; MORIGI, 2002)(BAILLY; LONGO, 2008).

## 1.1 A TEORIA H

Alguns tipos de sistemas complexos fora do equilíbrio podem ser estudados admitindo-se a existência de um conjunto de subsistemas acoplados formando uma estrutura hierárquica no tempo e/ou no espaço. Em princípio, cada subsistema pode ser caracterizado por uma variável macroscópica que varia lentamente no tempo, como por exemplo a temperatura local de sistemas termodinâmicos complexos em regime estacionário. Se admitirmos que as escalas de tempo de um nível para outro da hierarquia são muito separadas, podemos usar o princípio de Markov e considerar a distribuição de probabilidade de um observável em um dado subsistema como condicionada pelo valor do observável no subsistema imediatamente abaixo na hierarquia. Como explicado em (SALAZAR; VASCONCELOS, 2010a), se definirmos o parâmetro que caracteriza o equilíbrio local no nível  $i$  da hierarquia como  $\xi_i(t)$  podemos escrever a seguinte equação estocástica geral para sua evolução temporal

$$d\xi_i = \gamma_i(\xi_{i-1} - \xi_i)dt + k_i \xi_i^s \xi_{i-1}^{s-1} dW_i(t), \quad (1.1)$$

onde  $k_i$  e  $\gamma_i$  são parâmetros positivos arbitrários,  $s \in \{1/2, 1\}$  e cada  $dW_i(t)$  é um processo de Wiener independente. Na hipótese de grande separação de escalas  $\gamma_1 \ll \dots \ll \gamma_{N-1} \ll \gamma_N$  podemos encontrar a solução estacionária de (1.1) considerando  $\xi_{i-1}$  como fixo. Obtemos para

$s = 1/2$  a seguinte distribuição condicional

$$p(\xi_i|\xi_{i-1}) = \frac{(\beta_i/\xi_{i-1})^{\beta_i}}{\Gamma(\beta_i)} \xi_i^{\beta_i-1} e^{-\beta_i \xi_i/\xi_{i-1}}, \quad (1.2)$$

que é uma distribuição gama com parâmetro  $\beta_i = \frac{2\gamma_i}{k_i^2}$ . Usando (1.2) podemos escrever a distribuição de base  $p(\xi_N)$  no nível mais alto da hierarquia integrando a distribuição conjunta, ou seja

$$p(\xi_N) = \int \prod_{i=1}^N p(\xi_{i+1}|\xi_i) d\xi_i. \quad (1.3)$$

Em (MACÊDO *et al.*, 2017), a integral múltipla em (1.3) foi calculada com a ajuda das funções G de Meijer (COSTA, 2012), obtendo a fórmula explícita

$$p(\xi_N) = \frac{\omega}{\xi_0 \Gamma(\vec{\beta})} G_{N,0}^{0,N} \left( - \middle| \frac{\omega \xi_N}{\xi_0} \right), \quad (1.4)$$

onde  $\omega = \prod_{i=1}^N \beta_i$  e  $\Gamma(\vec{\beta}) = \prod_{i=1}^N \Gamma(\beta_i)$ . Esta fórmula é um dos principais resultados da teoria H. Juntamente com uma expressão similar para o caso  $s = 1$ , as distribuições de base da teoria H têm sido usada com muito sucesso para descrever estatisticamente vários tipos de sistemas complexos, como fluidos turbulentos (SALAZAR; VASCONCELOS, 2010b)(SALAZAR; VASCONCELOS, 2012), mercado financeiro (MACÊDO *et al.*, 2017), lasers aleatórios (GONZALEZ *et al.*, 2017) e cavidades balísticas caóticas (BOHÓRQUEZ; HERNANDO, 2018).

## 1.2 PRODUÇÃO DE ENTROPIA EM PROCESSOS ESTOCÁSTICOS

A solução obtida na seção anterior para a teoria H descreve apenas o regime estacionário, onde o sistema está em um estado de máxima entropia. No entanto, uma descrição mais completa deve incluir também a forma como o sistema relaxa para o equilíbrio quando perturbado por um agente externo. Sistemas normais apresentam uma relaxação exponencial controlada por uma única escala de tempo. O processo estocástico correspondente é denominado de processo Ornstein-Uhlenbeck, que basicamente é uma equação de Fokker-Planck com um termo de deriva linear e um coeficiente de difusão constante.

Uma maneira simples de quantificar o processo de relaxação ao equilíbrio é através da taxa de produção de entropia, definida por  $\dot{S} \equiv dS/dt$ , onde

$$S(t) = - \int dx P(x, t) \ln P(x, t)$$

é a entropia de Shannon e  $P(x, t)$  é a distribuição de probabilidade que descreve o processo estocástico da variável contínua  $x$  em tempo arbitrário. Pode-se mostrar (TOMÉ, 2006) que para processos estocásticos markovianos  $\dot{S} = \Pi(t) - \Phi(t)$ , onde  $\Pi(t)$  é a taxa de produção de entropia e  $\Phi(t)$  é o fluxo de entropia. Pela segunda lei da termodinâmica, devemos ter  $\Pi \geq 0$ , o que tem sido verificado na vasta literatura de soluções analíticas e numéricas de processos

estocásticos. A obtenção de expressões analíticas para a taxa de produção de entropia na teoria H é um dos interessantes problemas abertos na teoria de sistemas complexos e é um dos objetivos desta dissertação, conforme descrito na próxima seção.

### 1.3 OBJETIVOS DA DISSERTAÇÃO

Nesta dissertação, faremos um estudo detalhado da evolução temporal da entropia em processos estocásticos discretos associados com a teoria H. O trabalho está dividido em 2 capítulos principais, uma conclusão e a presente introdução. No capítulo 2 é feita uma breve revisão da teoria de processos estocásticos através dos dois sistemas de probabilidades: o bayesiano de Jaynes e o axiomático de Kolmogorov. Do ponto de vista interpretativo, essas duas abordagens são complementares e podem ser usadas para obter de forma independente uma formulação da equação mestra de sistemas fora do equilíbrio. Introduzimos em seguida o método de Baez, que permite obter de forma mais intuitiva a equação mestra do sistema e a matriz de taxas de probabilidade. Após isto, obtemos as equações necessárias para analisar os parâmetros de um sistema termodinâmico fora do equilíbrio. Finalmente é feita uma introdução formal à teoria H e mostramos como no regime estacionário uma formulação hierárquica discreta pode ser implementada. Na seção 2.3 obtemos uma distribuição Binomial Negativa (BN) compondo uma distribuição de Poisson com uma distribuição gama. Um dos resultados do presente trabalho é a proposta de uma aproximação do tipo Born-Oppenheimer para descrever a dinâmica dos processos discretos hierárquicos da teoria H.

No capítulo 3, apresentamos os resultados analíticos principais do trabalho, onde introduzimos um método de análise de sistemas fora do equilíbrio baseado na taxa de produção de entropia. Para isto, primeiramente obtemos as equações mestras dos processos de Poisson e binomial negativo. Em seguida, obtemos a matriz de taxas de probabilidade que é usada para calcularmos tanto fluxo quanto a taxa de produção de entropia. Por último, propomos uma aproximação do tipo Born-Oppenheimer para obter uma relação de recorrência na forma integral partindo da teoria H discreta no regime estacionário. Esta última permite gerar uma boa aproximação para a taxa de produção de entropia da teoria H para níveis arbitrários na hierarquia.

## 2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Um dos problemas que levou à consolidação da mecânica estatística de não-equilíbrio, após os trabalhos seminais de Ludwig Boltzmann, foi o estudo detalhado do movimento de grãos de pólen suspensos em água, observado por Robert Brown em 1827. A primeira solução veio da abordagem de A. Einstein em 1905 com as suposições de que, primeiro, o movimento seria causado pelo impacto das moléculas do líquido nos grãos e, segundo, que apenas com uma análise estatística seria possível descrevê-lo. A abordagem de Einstein, apesar de ousada, tendo em vista que a existência de átomos e moléculas ainda estava sob intenso debate, era basicamente fenomenológica, uma vez que não fazia referência direta às variáveis microscópicas para calcular a constante de difusão. No entanto, em 1908, Langevin usou a equação de movimento de Newton na presença de uma força aleatória e forneceu uma equação para a constante de difusão do sistema em função de parâmetros microscópicos. Estas duas abordagens evoluíram respectivamente para o método da equação de Fokker-Planck e o cálculo estocástico de Itô.

Apesar de bastante robusta para a descrição de sistemas dinâmicos normais, caracterizados essencialmente pelo teorema central do limite e por uma relaxação linear com uma única escala de tempo, esta abordagem tradicional falha na descrição de certos tipos de sistemas complexos, como a turbulência, que tipicamente exibem uma hierarquia de escalas de tempo. Uma recente linha de pesquisa conhecida como super-estatística têm abordado esses problemas. Os princípios desta teoria apresentados em (BECK; COHEN; SWINNEY, 2005)(TOUCHETTE; BECK, 2005) são:

- Considera-se um sistema inhomogêneo dividido em células espaciais caracterizadas por um parâmetro extensivo  $\beta$ .
- Assume-se que cada célula chega ao equilíbrio muito rápido, ou seja o tempo de relaxação é curto.
- O parâmetro  $\beta$  é aproximadamente constante em cada escala de tempo.
- Para um tempo suficientemente grande a distribuição estacionária se apresenta como uma composição do fator de Boltzmann,  $e^{-\beta E}$ , com uma distribuição de base  $f(\beta)$ .

Não obstante, a abordagem da super-estatística não oferece um modelo geral para a dedução da distribuição  $f(\beta)$  a partir de uma dinâmica estocástica. Isto foi feito pela teoria H (MACÊDO *et al.*, 2017), que introduziu no processo a noção de hierarquia, conforme veremos neste capítulo.

A análise de processos estocásticos hoje em dia segue duas linhas principais de pensamento (ou interpretações): a abordagem *relativista ou bayesiana* e a abordagem *absolutista ou frequencista*, cada um com seus sistemas de probabilidades, conceitos e ferramentas estatísticas.

A diferença principal entre as análises é devida à interpretação de probabilidade e de processos aleatórios. Na abordagem bayesiana, por exemplo, considera-se que sempre é possível obter mais informação sobre o sistema até alcançar a certeza de um evento e com isto pode-se aprimorar a probabilidade dependendo da informação a priori que se possui. Em outras palavras, a aleatoriedade é apenas a falta de informação. Por outro lado, na abordagem absoluta considera-se a probabilidade como uma propriedade intrínseca do sistema (como ocorre na teoria quântica), logo a probabilidade de um evento é em geral independente da informação a priori sobre o sistema e a única garantia de certeza é que os eventos vão se manifestar com uma determinada frequência se o experimento for repetido sob condições idênticas. Para o desenvolvimento desses pensamentos foram criados sistemas de probabilidades que expõem suas características e facilitam as aplicações: o sistema bayesiano de Jaynes e o sistema axiomático de Kolmogorov.

A interpretação da entropia em sistemas fora do equilíbrio depende de maneira fundamental da escola de pensamento adotada. Por exemplo, na formulação bayesiana, a entropia é a uma medida da informação faltante para uma descrição exata microscópica do sistema. Sua produção pode ser atribuída a uma perda de controle sobre os mecanismos microscópicos que operam nas pequenas escalas. Em outras palavras, a entropia de um sistema depende crucialmente do observador, mais precisamente da informação que ele possui sobre o sistema, sendo portanto uma grandeza relativa, apesar da descrição da dinâmica ser objetiva. Para evitar tomarmos partido no debate filosófico sobre a natureza da entropia, vamos adotar nesta dissertação uma postura neutra e apresentar os dois sistemas de probabilidade.

## 2.1 SISTEMAS DE PROBABILIDADE ESTATÍSTICA

Qualquer sistema de probabilidade deve em última análise ser capaz de fornecer ferramentas estatísticas apropriadas para descrever experimentos em sistemas físicos. Para deixar claro nosso foco principal, resumimos abaixo os principais procedimentos para a aquisição e armazenamento de dados propensos a uma análise estatística, independentemente do sistema de probabilidade adotado.

- Admite-se um conjunto de condições experimentais que se repetem tantas vezes quanto se queira.
- A série de eventos que surgem como resultado da aplicação das condições experimentais é armazenada.
- Se uma série de eventos produzidos forma um conjunto  $C$  definido de uma forma específica, diz-se que o evento  $C$  aconteceu.
- É possível atribuir um número real  $P(C)$  ao evento  $C$ .
- O número  $P(C)$  é tal que se  $N$  for a quantidade de condições e  $n$  for a quantidade de ocorrências de  $C$  então o valor de  $P(C)$  é praticamente igual a  $n/N$ . Ao mesmo tempo,

se  $P(C)$  for próximo a zero e o conjunto de condições não se repeti se pode dizer com certeza quase absoluta que  $C$  não acontece.

Vejamos a seguir como os sistemas bayesiano de Jaynes e o axiomático de Kolmogorov satisfazem as condições mínimas para a criação de ferramentas estatísticas adequadas à análise de séries temporais de experimentos em sistemas físicos complexos.

### 2.1.1 Sistema bayesiano de Jaynes

O sistema bayesiano de Jaynes representa um tipo de lógica inferencial de modo que podem-se estabelecer silogismos para eventos aleatórios. Nosso resumo é baseado no livro de Jaynes (JAYNES, 2003). Iniciamos expondo os silogismos Aristotélicos da seguinte forma:

$$\text{Silogismo forte: } \begin{cases} \mathbf{A} \Rightarrow \mathbf{B} \\ \text{se } \mathbf{A} \text{ é certo} \\ \Rightarrow \mathbf{B} \text{ é certo} \end{cases} \quad (2.1)$$

$$\text{E sua Inversa: } \begin{cases} \mathbf{A} \Rightarrow \mathbf{B} \\ \text{se } \mathbf{B} \text{ é falso} \\ \Rightarrow \mathbf{A} \text{ é falso} \end{cases} \quad (2.2)$$

Assim como um silogismo fraco ou menos dedutivo:

$$\text{Silogismo fraco: } \begin{cases} \mathbf{A} \Rightarrow \mathbf{B} \\ \text{se } \mathbf{B} \text{ é certo} \\ \Rightarrow \mathbf{A} \text{ é mais provável} \end{cases} \quad (2.3)$$

A complexidade de seguir um raciocínio com maior número de eventos ou relações ilustra a necessidade de uma álgebra dedutiva. George Boole apresentou um conjunto de axiomas para manipular algebricamente operações puramente lógicas em 1854, mostradas, por exemplo, no livro de Elliott (MENDELSON, 1970). Para melhor compreensão, vamos supor que o evento  $\mathbf{A}$  é o conjunto de todos os experimentos que têm um resultado esperado. Usemos como exemplo o resultado sucesso, e  $\mathbf{B}$  e  $\mathbf{C}$  são os conjuntos de vários experimentos com diferentes resultados logo, são definidas as seguintes operações de conjunto (igualmente válidas para  $\mathbf{C}$ ):

- I.  $\mathbf{AB} = \mathbf{A} \cap \mathbf{B}$ , é o conjunto de experimentos comuns nos dois eventos.
- II.  $\mathbf{A} + \mathbf{B} = \mathbf{A} \cup \mathbf{B}$ , é o conjunto de experimentos que inclui todos os experimentos de  $\mathbf{A}$  e  $\mathbf{B}$ .
- III.  $\bar{\mathbf{A}}$  é o conjunto de todos os experimentos fracasso, por tanto  $\bar{\bar{\mathbf{A}}} = \mathbf{A}$ .
- IV.  $\mathbf{A} = \mathbf{B}$  implica que todos os experimentos de  $\mathbf{B}$  são sucesso também e têm o mesmo número de elementos.

V.  $\emptyset$  é o conjunto que contém nenhum experimento, vazio por conseguinte.

Os axiomas de Boole podem-se escrever agora como:

$$\text{Idempotência: } (\mathbf{A}\mathbf{A} = \mathbf{A}); (\mathbf{A} + \mathbf{A} = \mathbf{A})$$

$$\text{Comutatividade: } (\mathbf{A}\mathbf{B} = \mathbf{B}\mathbf{A}); (\mathbf{A} + \mathbf{B} = \mathbf{B} + \mathbf{A})$$

$$\text{Associatividade: } (\mathbf{A}(\mathbf{B}\mathbf{C}) = (\mathbf{A}\mathbf{B})\mathbf{C}); (\mathbf{A} + (\mathbf{B} + \mathbf{C}) = (\mathbf{A} + \mathbf{B}) + \mathbf{C})$$

$$\text{Distributividades: } (\mathbf{A}(\mathbf{B} + \mathbf{C}) = \mathbf{A}\mathbf{B} + \mathbf{A}\mathbf{C}); (\mathbf{A} + (\mathbf{B}\mathbf{C}) = (\mathbf{A} + \mathbf{B})(\mathbf{A} + \mathbf{C}))$$

$$\text{Dualidade: } (\mathbf{C} = \mathbf{A}\mathbf{B} \Rightarrow \bar{\mathbf{C}} = \bar{\mathbf{A}} + \bar{\mathbf{B}}); (\mathbf{C} = \mathbf{A} + \mathbf{B} \Rightarrow \bar{\mathbf{C}} = \bar{\mathbf{A}}\bar{\mathbf{B}})$$

**Definição 2.1.** *Seja  $\mathbf{U} = \{U_1, U_2, \dots, U_N\}$  o conjunto de todos os resultados obtidos de uma série de  $N$  experimentos e  $\mathbf{A} = \{A_i; i = \overline{1, \nu}\} \subset \mathbf{U}$  então:*

$$P_{U_i} = \frac{1}{N} \quad (2.4)$$

$$P_{\mathbf{A}} = \frac{\nu}{N}; \quad \forall \nu \leq N \quad (2.5)$$

$$P_{\emptyset} = 0 \quad (2.6)$$

$$\Rightarrow P_{\mathbf{U}} = 1 \quad (2.7)$$

Vamos supor dois grupos de experimentos por separado ( $\mathbf{B}$  e  $\mathbf{C}$ ) e vamos condicionar a plausibilidade de  $\mathbf{B}$  à de  $\mathbf{C}$ . A probabilidade de obter  $\mathbf{B}$  se chama de probabilidade condicionada por  $\mathbf{C}$  e se expressa como  $P_{B|C}$ . Esta possui as seguintes regras:

$$\text{a) } P_{AB|C} = P_{A|C}P_{B|AC} = P_{B|C}P_{A|BC}$$

$$\text{b) } P_{A+B|C} = P_{A|C} + P_{B|C} - P_{AB|C},$$

que são chamadas de regras de multiplicação (a)) e soma (b)) respetivamente. Agora é possível ver que a condição (2.1) em termos de probabilidade pode ser expressada como:

$$P_{B|AC} = \frac{P_{AB|C}}{P_{A|C}}, \quad (2.8)$$

onde  $\mathbf{C} = \mathbf{A} \Rightarrow \mathbf{B}$ . Na prática, estas probabilidades podem ser achadas com a informação a priori do problema. No caso anterior,  $\mathbf{C}$  é uma informação a priori. Note que se  $\mathbf{A} + \bar{\mathbf{A}} = \mathbf{U}$  a probabilidade de (2.7) usando o item (b)) na presença da informação  $\mathbf{B}$  fica:

$$P_{A+\bar{A}|B} = P_{A|B} + P_{\bar{A}|B} - P_{A\bar{A}|B} \quad (2.9)$$

$$\text{Como } (P_{A\bar{A}|B} = 0); (P_{\bar{A}|B} = 1 - P_{A|B}) \quad (2.10)$$

$$\Rightarrow P_{A+\bar{A}|B} = 1 \quad (2.11)$$

Mais ainda, se o conjunto  $\mathbf{A}$  é disjuncto então:

$$P_{\sum_i A_i|B} = \sum_i P_{A_i|B}, \quad (2.12)$$

a qual no caso de  $\mathbf{U}$  é a equação (2.11) já que o conjunto das proposições  $\mathbf{A} \cap \bar{\mathbf{A}}$  é exaustivo.

Trabalhando igualmente sobre o item (a)) se chega a:

$$P_{\prod_i A_i|B} = P_{A_1|B} P_{A_2|A_1B} P_{A_3|A_1A_2B} \cdots P_{A_N|\prod_i A_iB} \quad (2.13)$$

Isto leva ao teorema da probabilidade total.

**Teorema 2.1** (Teorema da Probabilidade Total). *Seja um conjunto  $\mathbf{A} = \{A_1; A_2; \dots A_N\}$  de proposições exclusivas e exaustivas na presença da proposição  $\mathbf{C}$ , então para uma outra proposição arbitrária  $\mathbf{B}$ :*

$$P_{B|C} = \sum_{i=1}^N P_{A_i|C} P_{B|A_iC} \quad (2.14)$$

### 2.1.2 Sistema de Kolmogorov

Um dos sistemas de probabilidade que permite definir de forma rigorosa o conceito de probabilidade é o sistema axiomático de A. Kolmogorov (KOLMOGOROV, 1950). Antes de apresentá-lo, precisamos primeiro de introduzir algumas definições de estruturas matemáticas básicas.

**Definição 2.2** ( $\sigma$ -álgebra). *Seja  $\mathbf{X}$  um conjunto arbitrário não-vazio de  $N$  elementos, e seja  $\mathbf{x}_i \subset \mathbf{X}$ , definamos  $\Omega = \bigcup_{i=1}^{2^N} \mathbf{x}_i$  o conjunto de todos os subconjuntos de  $\mathbf{X}$ , então uma coleção  $\sigma \subset \Omega$  é chamada de  $\sigma$ -álgebra em  $\mathbf{X}$  se:*

- i.  $\emptyset \in \sigma$ ;  $\mathbf{X} \in \sigma$
- ii.  $\exists \mathbf{A} \in \sigma \mid \mathbf{A}^c = \mathbf{X} \setminus \mathbf{A} \in \sigma$
- iii. Uma coleção de  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{A}' = (A_j) \in \sigma$ ;  $\forall j \in \mathbb{N}$

Esta definição rigorosa é importante para que possamos definir um espaço mensurável com o que se pode chegar aos axiomas de probabilidade de Kolmogorov. O conjunto  $\Omega$  pode ser chamado também de espaço amostral de um experimento aleatório.

**Exemplo 1.** Seja  $\mathbf{X} = \{0, 1\}$  então

$$\Omega = \{\emptyset; \{0\}; \{1\}; \{0, 1\}\} \quad (2.15)$$

$$\sigma_1 = \{\emptyset; \{0\}; \{0, 1\}\} \quad (2.16)$$

$$\sigma_2 = \{\emptyset; \{1\}; \{0, 1\}\} \quad (2.17)$$

$$\sigma_3 = \{\emptyset; \{0, 1\}\} \quad (2.18)$$

$$\sigma_4 = \{\emptyset; \{0\}; \{1\}; \{0, 1\}\} \quad (2.19)$$

$\sigma_3$  é a  $\sigma$ -álgebra trivial e  $\sigma_4 = \Omega$  é a  $\sigma$ -álgebra discreta. Note também que se fizermos  $\mathbf{A} = \{0\}$  então  $\sigma_4 = \{\emptyset; \mathbf{A}; \mathbf{A}^c; \mathbf{X}\}$ , isto se chama traço de  $\mathbf{A}$ . Outra análise que pode-se fazer é que:

$$\sigma_3 = \sigma_1 \cap \sigma_2 \cap \sigma_4 \quad (2.20)$$

Demonstrando, por indução, chega-se a um resultado mais geral de como gerar  $\sigma$ -álgebras.

**Definição 2.3** ( $\sigma$ -álgebra gerada). Seja uma coleção de todas as  $\sigma$ -álgebras de  $\mathbf{X}$   $\{\sigma_n\}_{n \in \mathbb{M}}$  tal que  $\exists \mathbf{A} \in \sigma_n \forall n$ , então se chama de  $\sigma$ -álgebra gerada por  $\mathbf{A}$  a:

$$\sigma[\mathbf{A}] = \bigcap_{n \in \mathbb{M}} \sigma_n \quad (2.21)$$

**Exemplo 2.** Seja  $\mathbf{X} = \{0, \frac{1}{2}, 1\}$  e  $\mathbf{A} = \{\frac{1}{2}, 1\}$  então:

$$\Omega = \{\emptyset; \{0\}; \{\frac{1}{2}\}; \{1\}; \{0, \frac{1}{2}\}; \{0, 1\}; \{\frac{1}{2}, 1\}; \{0, \frac{1}{2}, 1\}\} \quad (2.22)$$

$$\Rightarrow \sigma[\mathbf{A}] = \{\emptyset; \{\frac{1}{2}, 1\}; \{0, \frac{1}{2}, 1\}\} \quad (2.23)$$

Note que  $\sigma[\mathbf{A}]$  é também a menor  $\sigma$ -álgebra que contém  $\mathbf{A}$

**Definição 2.4** (Espaço mensurável). Sejam  $\mathbf{X}$  e  $\mathbf{A}$  dois conjuntos e  $\sigma$  um  $\sigma$ -álgebra de  $\mathbf{X}$  tal que  $\mathbf{A} \in \sigma$ , então pode-se dizer que  $\mathbf{A}$  é mensurável em  $\mathbf{X}$  e o par  $(\mathbf{X}, \sigma)$  é um espaço mensurável.

**Definição 2.5** (Mensurabilidade). Sejam  $(\mathbf{X}, \sigma_x)$  e  $(\mathbf{Y}, \sigma_y)$  dois espaços mensuráveis, pode-se dizer que uma função  $f : \mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}$  é mensurável em  $\sigma_x$  e  $\sigma_y$  se  $\exists f^{-1}(\mathbf{A}) \in \sigma_x \forall \mathbf{A} \in \sigma_y$ .

**Definição 2.6** (Medida). Uma medida de  $\sigma$  no espaço mensurável  $(\mathbf{X}, \sigma)$  é uma aplicação  $\mu : \sigma \rightarrow \mathbb{R}_+ \cup \{\infty\}$ , tal que  $\mu(\emptyset) = 0$  e  $\forall (\mathbf{A}_n)_{n \in \mathbb{N}}$  de  $\sigma$  cumpre-se a propriedade de  $\sigma$ -aditividade:

$$\mu\left(\bigcup_{n \in \mathbb{N}} \mathbf{A}_n\right) = \sum_{n \in \mathbb{N}} \mu(\mathbf{A}_n) \quad (2.24)$$

**Exemplo 3.** Seja  $\mathbf{X} = \{0, 1\}$  e  $\sigma = \{\emptyset; \{0\}; \{1\}; \{0, 1\}\}$  um exemplo de medida em  $\sigma$  é:

$$\mu(\emptyset) = 0; \mu(\{0\}) = 1; \mu(\{1\}) = 0; \mu(\{0, 1\}) = 1 \quad (2.25)$$

Tomadas  $\mathbf{A}_1 = \{0\}$  e  $\mathbf{A}_2 = \{1\}$ .

**Definição 2.7** ( $\sigma$ -álgebra de Borel). *Seja um conjunto  $\mathbf{A} = \{(a, b] \subset (0, 1]\}$ , então a  $\sigma$ -álgebra gerada por  $\mathbf{A}$  se chama de Borel no intervalo unidade e se denota como:*

$$\mathfrak{B} = \sigma[\mathbf{A}] \quad (2.26)$$

*Igualmente se  $\mathbf{A} = \{(-\infty, a]; (b, \infty]\}$  se têm uma  $\sigma$ -álgebra de Borel nos reais:*

$$\mathfrak{B}(\mathbb{R}) = \sigma[\mathbf{A}] \quad (2.27)$$

**Definição 2.8** (Função Boreliana). *Sejam dois espaços mensuráveis  $(\mathbf{X}, \sigma)$  e  $(\mathbb{R}, \mathfrak{B}(\mathbb{R}))$  diz-se que uma função  $f : \mathbf{X} \rightarrow \mathbb{R}$  é boreliana se for mensurável em relação às  $\sigma$ -álgebras  $\sigma$  e  $\mathfrak{B}(\mathbb{R})$ , ou seja:*

$$f^{-1}(\mathbf{A}) \in \sigma, \forall \mathbf{A} \in \mathfrak{B}(\mathbb{R}) \quad (2.28)$$

*Note também que se são borelianas as funções  $f : \mathbf{X} \rightarrow \mathbb{R}$  e  $g : \mathbf{X} \rightarrow \mathbb{R}$  então são igualmente borelianas as seguintes combinações:*

$$h_1 = \alpha f + \beta g \quad (2.29)$$

$$h_2 = fg \quad (2.30)$$

$$\forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}$$

**Definição 2.9** (Função Característica). *Sejam  $\mathbf{A} \subset \mathbf{X} \neq \emptyset$  e uma função  $\phi : \mathbf{X} \rightarrow \mathbb{R}$ , se chama de função característica se:*

$$\phi_{\mathbf{A}}(x) = \begin{cases} 1, & \text{se } x \in \mathbf{A} \\ 0, & \text{se } x \notin \mathbf{A} \end{cases} \quad (2.31)$$

**Definição 2.10** (Representação Normal). *Seja uma função boreliana  $f : \mathbf{X} \rightarrow \mathbb{R}$  e seja uma coleção  $(A_i)_{i \in \mathbb{N}}$  de  $\mathbf{X}$  tal que:*

$$\mathbf{X} = \bigcup_{i \in \mathbb{N}} A_i \quad (2.32)$$

$$A_i \cap A_j = \emptyset; i, j \in \mathbb{N} \quad (2.33)$$

*Diz-se que  $f$  têm uma representação normal em  $\mathbf{X}$  se existem  $f_i \in \mathbb{R}$  e  $A_i$  mensuráveis que cumprem:*

$$f(x) = \sum_{i \in \mathbb{N}} f_i \phi_{A_i}(x) \quad (2.34)$$

**Definição 2.11** (Função Simples). *Uma função boreliana  $f$  é dita simples se para  $f : \mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y} \subset \mathbb{R}$  tal que  $\mathbf{Y} = \{Y_1, Y_2, \dots, Y_n\}$  com  $n \in \mathbb{N}$  sempre que se garanta  $\exists m \in \mathbb{N} | m > n$  ( $\mathbf{Y}$  é finito).*

### 2.1.3 Processos estocásticos

**Definição 2.12** (Espaço de probabilidade). *Considere o espaço amostral  $\Omega$  da definição 2.2, e considere  $\sigma_f$  um  $\sigma$ -álgebra de  $\mathbf{P}$  tal que o par  $(\Omega, \sigma_f)$  é mensurável, logo se:*

$$\exists P(\mathbf{X}) : \sigma_f \rightarrow [0, 1] \in \mathbb{R} \quad (2.35)$$

$$P(\emptyset) = 0 \quad (2.36)$$

$$P(\Omega) = 1 \quad (2.37)$$

$$P(\mathbf{X}) \text{ possui } \sigma\text{-aditividade em } \sigma_f \quad (2.38)$$

*Diz-se que a tripla  $(\Omega, \sigma_f, P(\mathbf{X}))$  é um espaço de probabilidade.*

**Definição 2.13** (Probabilidade). *Seja um espaço de probabilidades  $(\Omega, \sigma_f, P(\mathbf{X}))$  com  $\mathbf{X} \in \sigma_f$  tal que  $\Omega = \{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n\}_{n \in \mathbb{N}}$  e considere  $\vec{P}(\Omega) = (P(\omega_1), P(\omega_2), \dots, P(\omega_n))_{n \in \mathbb{N}}$  então:*

$$P(\mathbf{X}) = \sum_{\omega_i \in \mathbf{X}} P(\omega_i) \quad (2.39)$$

*Note que*

$$P(\Omega) = \sum_{\omega_i \in \Omega} P(\omega_i) = 1 \quad (2.40)$$

**Definição 2.14** (Variável Aleatória). *Seja o espaço de probabilidade  $(\Omega, \sigma_f, P(\mathbf{X}))$  e o espaço mensurável de Borel nos reais  $(\mathbb{R}, \mathfrak{B}(\mathbb{R}))$ , diz-se que uma variável aleatória é uma função  $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  tal que  $X^{-1}(\mathbf{A}) \in \sigma_f \forall \mathbf{A} \in \mathfrak{B}(\mathbb{R})$ .*

#### 2.1.3.1 Axiomas de Kolmogorov

**Definição 2.15** (Processo estocástico). *Chamamos de processo estocástico a uma coleção de variáveis aleatórias  $\{X_t\}_{t \in \mathbb{T}}$  tal que  $\mathbb{T} \subset \mathbb{R}$ . O processo é discreto se também  $\mathbb{T} \subset \mathbb{N}$  e contínuo no caso  $\mathbb{T} = [a, b] \forall a, b \in \mathbb{R}$ . É usual em processos estocásticos assumir variáveis aleatórias dependentes do tempo, logo é mais correto dizer que o subconjunto  $\mathbb{T} \subset \mathbb{R}_0^+$ .*

Por conveniência, usaremos de notação  $z_i$  para o par  $(x_i, t_i)$ .

**Definição 2.16** (Processos de dimensão finita). *As distribuições de dimensão finita do processo estocástico  $\{X_t\}_{t \in \mathbb{T}}$  são definidas como:*

$$P_s(z_1; z_2; \dots; z_s) \equiv P(\{\omega \in \Omega \mid X_{t_1}(\omega) \leq x_1; X_{t_2}(\omega) \leq x_2; \dots; X_{t_s}(\omega) \leq x_s\}) \quad (2.41)$$

**Definição 2.17** (Axiomas de Kolmogorov). *Um processo estocástico pode ser bem definido a partir do conjunto de funções  $P_s(z_1; z_2; \dots; z_s)$  se e somente se:*

a)  $P_s \geq 0$

b)  $P_s(z_1; \dots; z_i; \dots; z_j; \dots; z_s) = P'_s(z_1; \dots; z_j; \dots; z_i; \dots; z_s) \forall i, j = \overline{1, s}$

$$c) P_{s-1} = \int P_s dx_s$$

$$d) \int P_1(z_1) dx_1 = 1$$

Uma das críticas de Jaynes em (JAYNES, 2003) aos axiomas de Kolmogorov é a ausência do conceito de probabilidade condicional, a qual é fundamental nos silogismos aristotélicos, visto que todos os eventos são condicionados a algum tipo de informação a priori. Kolmogorov consegue substituir, usando a sigma-álgebra, a operação de negação considerando partes do conjunto universo  $\Omega$ , mas exige na maior parte das definições eventos disjuntivos, exigência que pode ser excessiva em muitos processos físicos onde se têm uma mistura de eventos. Vale lembrar que  $\Omega$  é sempre totalmente conhecido no sistema de Kolmogorov por ser, de fato, absolutista. Outra complicação no sistema de Kolmogorov vem da necessidade de escolher adequadamente o espaço de probabilidade  $(\Omega, \sigma_f, P)$ . Em (BORKAR; KONDA; MITTER, 2004), os autores mostram a utilização da condição de coerência de De Finetti para resolver este problema em sistemas muito grandes. O sistema de Kolmogorov, apesar das críticas, ainda é o mais versátil para a resolução de muitos problemas em física. Por exemplo, ele é muito útil em processos estocásticos do tipo cadeias de Markov, onde existe um ordenamento temporal.

Podemos introduzir probabilidade condicional no sistema de Kolmogorov através da regra de multiplicação, ver (2.1.1)(a)). Defina a função densidade de probabilidade da seguinte forma:

**Definição 2.18** (Densidade de probabilidade). *Seja  $f_s(z_1; z_2; \dots; z_s)$  a densidade de probabilidade da função de distribuição  $P_s(z_1; z_2; \dots; z_s)$  então:*

$$f_s(z_1; z_2; \dots; z_s) = \frac{\partial^s}{\partial x_1 \partial x_2 \dots \partial x_s} P_s(z_1; z_2; \dots; z_s) \quad (2.42)$$

Usando (2.1.1)(a) e (2.18) a densidade de probabilidade condicionada é definida como:

$$f_{k|s}(z_{s+1}; z_{s+2}; \dots; z_{s+k} | z_1; z_2; \dots; z_s) = \frac{f_{s+k}(z_1; z_2; \dots; z_s; z_{s+1}; \dots; z_{s+k})}{f_s(z_1; z_2; \dots; z_s)} \quad (2.43)$$

Usando esta definição, podemos classificar os processos estocásticos em três tipos, dependendo da forma de fatoração da distribuição conjunta:

A) Processo separável:

$$f_s(z_1; z_2; \dots; z_s) = \prod_{j=1}^s f_j(z_j). \quad (2.44)$$

Cada passo é estatisticamente independente do anterior. São processos puramente aleatórios e portanto cada medição pode ser considerada um experimento de Bernoulli independente.

B) Processo de Markov:

$$f_s(z_1; z_2; \dots; z_s) = f_1(z_1) \prod_{j=2}^s f_{1|1}(z_j|z_{j-1}). \quad (2.45)$$

Neste caso, a probabilidade de cada passo depende apenas do passo anterior e portanto é possível conhecer a probabilidade do evento futuro com a informação do presente.

C) Processos não-markovianos são caracterizados pela necessidade de introduzir uma função memória, pois a probabilidade de um evento futuro depende de todos os eventos passados.

#### 2.1.4 Processos de Markov e processos de salto

Andrei Andreevich Markov (1856–1922) foi um importante matemático russo que dedicou a maior parte das suas pesquisas ao desenvolvimento da teoria das cadeias de Markov. No entanto, foi apenas em 1926 que o pesquisador russo S. N. Bernstein utilizou pela primeira vez o termo "cadeia de Markov" (BASHARIN; LANGVILLE; NAUMOV, 2004) para designar processos de Markov com tempos discretos. Desde então, processos de Markov, tanto de tempo discreto (cadeias) quanto contínuo, têm sido usados com grande sucesso em diversas aplicações nas mais variadas áreas da ciência.

Para introduzir formalmente processos de Markov, vamos começar assumindo, sem perda de generalidade, o seguinte ordenamento temporal  $t_1 \leq t_2 \leq \dots \leq t_s$ . Então, a propriedade proposta por Markov em termos da probabilidade condicional pode ser representada como

$$f_{k|s}(z_{s+1}; z_{s+2}; \dots z_{s+k}|z_1; z_2; \dots z_s) = f_{k|1}(z_{s+1}; z_{s+2}; \dots z_{s+k}|z_s), \quad (2.46)$$

ou seja, a probabilidade condicional pode ser definida em termos do processo mais recente. Então, usando a definição (2.43) e aplicando (2.46) temos:

$$\text{Para } s = 1, k = 1 \quad f_{1|1}(z_2|z_1) = \frac{f_2(z_1; z_2)}{f_1(z_1)} \quad (2.47)$$

$$\text{Para } s = 2, k = 1 \quad f_{1|2}(z_3|z_1; z_2) = \frac{f_3(z_1; z_2; z_3)}{f_1(z_1; z_2)} = f_{1|1}(z_3|z_2) = \frac{f_2(z_2; z_3)}{f_1(z_2)} \quad (2.48)$$

$$\Rightarrow f_3(z_1; z_2; z_3) = f_1(z_1) \frac{f_2(z_1; z_2) f_2(z_2; z_3)}{f_1(z_1) f_1(z_2)} \quad (2.49)$$

Então, continuando com este procedimento até  $s = n - 1$  e  $k = 1$ , obtemos:

$$f_n(z_1; z_2; \dots z_n) = f_1(z_1) f_{1|1}(z_2|z_1) f_{1|1}(z_3|z_2) f_{1|1}(z_4|z_3) \dots f_{1|1}(z_n|z_{n-1}), \quad (2.50)$$

que é a equação básica de um processo de Markov.

### 2.1.4.1 Equação de Chapman-Kolmogorov

Considere outra vez, sem perda de generalidade, o ordenamento temporal  $t_1 \leq \dots \leq t_{s-1} \leq t' \leq t_s$ . Então, pela definição (2.18), os axiomas de Kolmogorov (*definição 2.17*) e usando a propriedade markoviana (2.50) temos:

$$f_{s-1}(z_1; \dots; z_{s-1}) = \int dx' \frac{\partial^s}{\partial_{x_1} \dots \partial_{x_{s-1}} \partial_{x'}} P_s(z_1; \dots; z_{s-1}; z') \quad (2.51)$$

$$= \int dx' \frac{\partial^s}{\partial_{x_1} \dots \partial_{x_{s-1}} \partial_{x'}} P'_s(z_1; \dots; z'; z_{s-1}) \quad (2.52)$$

$$f_{s-1}(z_1; \dots; z_{s-1}) = \int dx' f_s(z_1; \dots; z_{s-1}; z') \quad (2.53)$$

$$f_{s-1}(z_1; \dots; z_{s-1}) = \int dx' f_1(z_1) \prod_{j=2}^{s-2} f_{1|1}(z_j | z_{j-1}) f_{1|1}(z' | z_{s-1}) \quad (2.54)$$

Note que agora queremos calcular  $f_2(z_{s-1}; z_s)$ . Usando (2.51), obtemos

$$f_2(z_{s-1}; z_s) = \int dx' \frac{\partial^3}{\partial_{x_{s-1}} \partial_{x'} \partial_{x_s}} P_3(z_{s-1}; z'; z_s) \quad (2.55)$$

Multiplicando por  $\frac{1}{f_{s-1}}$  e usando a regra de Bayes, que expressa a probabilidade conjunta em termos da probabilidade condicional, obtemos

$$f_{1|1}(z_s | z_{s-1}) = \int dx' f_{1|2}(z_s | z_{s-1}; z') f_{1|1}(z' | z_{s-1}). \quad (2.56)$$

Finalmente, aplicando a propriedade de Markov no primeiro fator dentro da integral, chegamos à equação de Chapman-Kolmogorov:

$$f_{1|1}(z_s | z_{s-1}) = \int dx' f_{1|1}(z_s | z') f_{1|1}(z' | z_{s-1}), \quad (2.57)$$

que é um importante ponto de partida para obtenção das equações de Fokker-Planck e da equação mestra de processos markovianos.

### 2.1.4.2 Equação mestra

Consideraremos agora processos markovianos de tempo contínuo. A estratégia é usar a equação de Chapman-Kolmogorov para calcular  $\frac{dP_{1|1}(t)}{dt}$ . No entanto, precisamos primeiro analisar a diferenciabilidade de  $P_{1|1}(t)$ . A primeira análise que se pode fazer vem da condição de Lindeberg. Dado o ordenamento de tempos que estamos utilizando pode-se dizer que  $t_2 \rightarrow t_1 \Rightarrow t_2 = t_1 + \Delta t_1 \mid \Delta t_1 \rightarrow 0$ . O processo será contínuo  $\forall \epsilon > 0$  se:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|\Delta x| > \epsilon} dx f_{1|1}(x_2, t + \Delta t \mid x_1, t) = 0 \quad (2.58)$$

Isto quer dizer que devemos ter  $\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} f_{1|1}(x_2, t + \Delta t | x_1, t) = 0$  em  $|\Delta x| > \epsilon$ .

Suponha agora um processo com algumas descontinuidades, de modo que o seguinte limite existe

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} f_{1|1}(x_2, t + \Delta t | x_1, t) = W(x_2 | x_1, t), \quad (2.59)$$

onde  $W(x|y, t) \neq 0$ , para  $\forall x, y$  e  $t$  em  $|\Delta x| \geq \epsilon \forall ; \epsilon > 0$ . Derivando a densidade de probabilidade, obtemos

$$\frac{df(x_2 | x_1, t)}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{f(x_2, t + \Delta t | x_1, t) - f(x_2 | x_1, t)}{\Delta t}. \quad (2.60)$$

Aplicando a equação (2.57), temos:

$$\frac{df(x_2 | x_1, t)}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_{|\Delta x| > \epsilon} dx' \frac{f(x_2, t + \Delta t | x', t)}{\Delta t} f(x' | x_1, t) - \frac{f(x_2 | x_1, t)}{\Delta t}. \quad (2.61)$$

Note que

$$\int_{|\Delta x| > \epsilon} dx' f(x', t + \Delta t | x_2, t) = 1 \quad (2.62)$$

Então, a equação (2.61) fica:

$$\begin{aligned} \frac{df(x_2 | x_1, t)}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} & \left[ \int_{|\Delta x| > \epsilon} dx' \frac{f(x_2, t + \Delta t | x', t)}{\Delta t} f(x' | x_1, t) \right. \\ & \left. - \int_{|\Delta x| > \epsilon} dx' \frac{f(x', t + \Delta t | x_2, t)}{\Delta t} f(x_2 | x_1, t) \right] \end{aligned} \quad (2.63)$$

$$\frac{df(x_2 | x_1, t)}{dt} = \int_{|\Delta x| > \epsilon} dx' \left[ W(x_2 | x', t) f(x' | x_1, t) - W(x' | x_2, t) f(x_2 | x_1, t) \right] \quad (2.64)$$

No caso de uma variável aleatória  $x$  discreta, este procedimento gera uma equação

$$\dot{P}_{mn}(t) = \sum_{n'} [W_{mn'}(t) P_{n'n}(t) - W_{n'm}(t) P_{mn}(t)], \quad (2.65)$$

que é a forma mais geral da equação mestra. No processo de obtenção desta equação admitimos que a variável aleatória é descontínua, ou seja a densidade de probabilidade só pode ter dois valores no menor intervalo de variação. Porém, se for considerado que existe uma continuidade de valores possíveis no intervalo  $|\Delta x| < \epsilon, \forall \epsilon > 0$  podemos fazer uma expansão em série de potências. Esta expansão normalmente é levada até a segunda ordem, resultando na equação de Fokker-Planck. Na forma mais geral, processos estocásticos podem ser uma combinação de saltos com trajetórias contínuas. Nesta dissertação, consideraremos apenas processos totalmente descontínuos ou discretos.

Existem várias maneiras de expressar a equação mestra. Por exemplo, podemos reescrever (2.65) na forma

$$\dot{P}_{mn}(t) = \sum_{n'} [(W_{mn'}(t) - \sum_k W_{n'k}(t)\delta_{mn'})P_{n'n}(t)], \quad (2.66)$$

o que deixa a equação mestra (para  $n$  fixo) com a forma de uma equação do tipo Schrödinger

$$\dot{P}_m(t) = \sum_{n'} H_{mn'} P_{n'}(t). \quad (2.67)$$

Note que a soma sobre  $n'$  implica transições nos dois sentidos. A similaridade com a equação de Schrödinger permitirá o uso de métodos poderosos de solução, que são normalmente usados em dinâmica quântica, conforme veremos na próxima seção.

### 2.1.5 Método de Baez para processos de salto

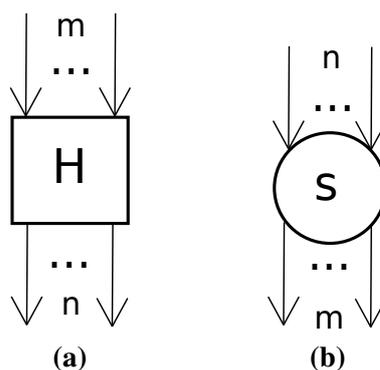
A forma da equação mestra mostrada em (2.67) reduz processos estocásticos discretos a um sistema de equações de taxas, no qual cada probabilidade obtida depende do tempo e de um parâmetro discreto. O sentido da recorrência das probabilidades na equação mestra indica a necessidade de conhecermos pelo menos o valor de  $P_n(t)$  em  $t = 0$  e  $n = 0$ , ou seja temos um problema do tipo Cauchy: a equação mestra pode em princípio ser resolvida conhecendo apenas a condição inicial. Pela demonstração apresentada na seção anterior, vemos que  $H_{mn}$  é um número diferente para cada par  $(n, m)$  e fornece a taxa de transição do sistema quando ele salta do valor  $n$  ao valor  $m$ . Portanto, o maior problema da modelagem via equação mestra é estimar o valor experimental das taxas de transição. As taxas podem ser obtidas através de uma análise detalhada da física do sistema, podendo ser evidentes como no caso do processo de Poisson ou mais elaboradas, como no caso do oscilador harmônico em contato com um banho térmico, onde as taxas de transição são dadas pelos elementos de matriz do acoplamento bipolar. Alternativamente, podemos empregar uma análise termodinâmica apropriada para relacionar as taxas de transição à função de partição do sistema. John C. Baez e Jacob D. Biamonte em (BAEZ; BIAMONTE, 2018) desenvolveram uma metodologia para chegar a uma equação mestra específica, incluindo portanto as taxas de transição. A proposição é simples e consiste basicamente no uso dos *diagramas de Petri* para representar as probabilidades e as taxas de transição do sistema em termos de um sistema quântico efetivo de férmions. As representações seguem a seguinte convenção

- Quadrados representam as interações.
- Círculos representam as espécies que vão interagir.
- A direção das setas indica o sentido das interações.

- A quantidade de setas indica a quantidade de uma mesma interação.

Podemos convenientemente chamar as interações que diminuem a população de uma espécie ( $s$ ) de destruições e as que aumentam de criações. Na figura 1 pode-se ver as representações para a criação de  $n$  cópias de uma espécie e a destruição de  $m$  cópias da mesma espécie. No item 1a se mostra o diagrama das interações ( $H$ ) e no item 1b o diagrama das espécies.

**Figura 1** – Representação diagramática das interações e espécies no método de Baez.



Fonte: O autor(2020)

Agora podemos construir diagramas específicos para representar processos estocásticos em termos de sistemas quânticos efetivos. Vamos ilustrar o procedimento com um exemplo de um sistema com muitos elétrons em uma dada região do espaço. Considere as seguintes situações para construir os diagramas de Petri em cada caso:

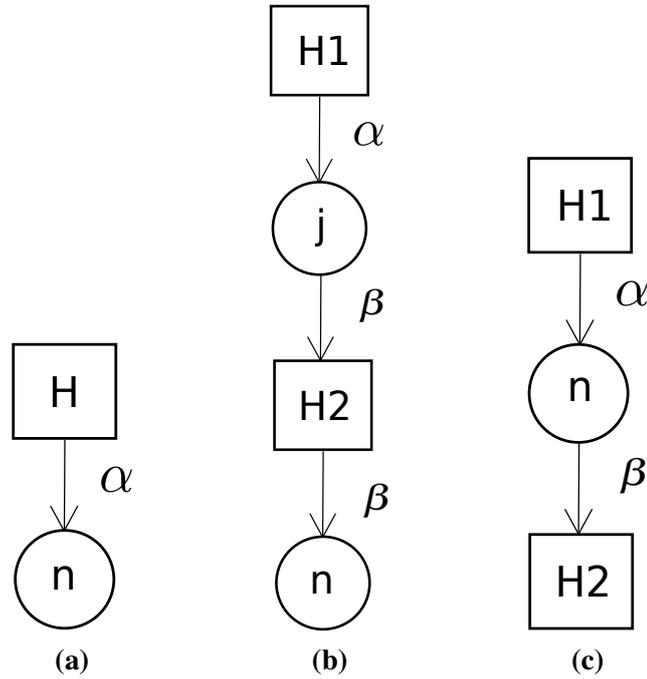
- Os elétrons estão separados por uma barreira de potencial com taxa de tunelamento  $\alpha$ .
- Os elétrons estão separados por duas barreiras de potencial, cada uma com taxa  $\alpha$  e  $\gamma$  respectivamente.
- Os elétrons estão separados por uma barreira com taxas  $-\beta^1$  e  $\alpha$ .

Definamos como uma espécie elétrons que conseguem atravessar a barreira. Então o procedimento deve ser o seguinte em cada caso: O item a) da figura 2 é o caso mais simples, indica uma fonte inesgotável de espécies de uma região para outra, como a taxa existe apenas para uma direção de tunelamento diz-se que é um processo unidirecional. O item b) é muito parecido com o anterior, diferenciando-se apenas pelo fato de que agora aparece outra espécie, caracterizada por elétrons localizados entre as duas barreiras. O controle destes elétrons é feito pela segunda barreira com taxa  $\beta$ . O item c) indica um processo bidirecional, isto é por causa da taxa  $\beta$  que atua tirando espécies.

Os diagramas de Petri ficariam como na figura 2.

<sup>1</sup> O sinal negativo indica a direção de tunelamento, neste caso, implica que os elétrons também podem pular no sentido contrario uma vez alcançado a região menos populada.

**Figura 2** – Diagramas de Petri de dois processos unidirecionais (itens a e b) e um processo bidirecional (item c).



Fonte: O autor(2020)

Suponha agora uma função  $F(z, t)$  definida pela série de potências convergente com coeficientes dados pela probabilidade  $P_n(t)$  com a forma:

$$F(z, t) = \sum_n P_n(t) z^n. \quad (2.68)$$

Note que

$$P_n(t) = \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n F(z, t)}{\partial z^n} \right|_{z=0}. \quad (2.69)$$

Esta é a função geradora de momentos do processo estocástico. Usando a equação mestra (2.65) obtemos

$$\sum_m \dot{P}_m(t) z^m = \sum_{m, n'} H'_{mn'} P_{n'} z^m \quad (2.70)$$

$$\dot{F}(z, t) = H \cdot F(z, t) \quad (2.71)$$

que é a equação que determina a dinâmica da função geradora. Podemos agora introduzir operadores de levantamento e abaixamento pelas relações

$$m^- F(z, t) = \frac{d}{dz} F(z, t) \quad (2.72)$$

$$m^+ F(z, t) = z F(z, t). \quad (2.73)$$

Pode-se verificar que

$$m^+m^- = m \quad (2.74)$$

$$[m^-, m^+] = 1. \quad (2.75)$$

O operador  $H$  é construído através os diagramas de Petri <sup>2</sup>. Uma seta na direção de criação de espécies implica um operador levantamento e uma seta na direção de destruição de espécies implica um operador abaixamento. Além disso, há um fator de correção que se obtém pela relação entre a definição de probabilidade e o operador  $H$ . Aplicando estas regras podemos construir os operadores  $H$  associados aos diagramas 2a, 2b e 2c respectivamente:

$$\text{a)) } H = \alpha(n^+ - 1)$$

$$\text{b)) } H = \alpha(j^+ - 1) + \beta(n^+j^- - j)$$

$$\text{c)) } H = \alpha(n^+ - 1) + \beta(n^- - n).$$

Este método mostrou-se extremadamente eficiente em problemas de interações químicas e biológicas em que se quer encontrar o processo estatístico que o caracteriza. No entanto, obter o diagrama pensando em uma dada distribuição é em geral difícil, por causa da inversão de pensamento. A lógica que leva a obtermos uma distribuição de probabilidades devido a uma série de eventos é normalmente o processo de contar os eventos de sucesso no universo de todos os eventos possíveis. O método de Baez foca na maneira que se obtém os eventos de sucesso de forma tal que o total e o número de espécies coincida em cada intervalo de tempo com a distribuição associada. Em problemas de reações químicas, por exemplo, as espécies são independentes umas das outras, mas em problemas mais gerais, como em processos de Bernoulli, as espécies podem estar explicitamente relacionadas e por isso torna-se mais conveniente adaptar o método de Baez para uma espécie só. Esta abordagem será apresentada mais detalhadamente na seção 3.2 desta dissertação. Uma grande vantagem desta representação é que podemos construir vários processos partindo do mais simples, o processo 2a, que como se verá é um processo de Poisson. Esta propriedade será muito útil para a nossa principal aplicação: a versão discreta da teoria H.

## 2.2 PRODUÇÃO DE ENTROPIA EM PROCESSOS ESTOCÁSTICOS

Uma das importantes aplicações da equação mestra consiste em obter a função de distribuição de probabilidade em situações de equilíbrio, levando-se em conta todas as transições que aconteceram até chegar a esse ponto. Vamos ilustrar isto com um exemplo.

Considere um oscilador harmônico quântico em um campo de radiação. Da mecânica estatística (SALINAS, 2005), sabemos que a probabilidade do oscilador estar no nível de energia

<sup>2</sup> O procedimento é similar à técnica de diagramas de Feynmann da teoria quântica de campos.

$n$  é dada por

$$P_n^e = \frac{e^{-\beta_T E_n}}{Z}, \quad (2.76)$$

onde  $\beta_T$  é o inverso da temperatura,  $\beta_T = \frac{1}{k_B T}$ ,  $Z$  é a função de partição e  $E_n = h\omega(n + 1/2)$ . O processo estocástico associado é conhecido como o processo de Pauli. Os coeficientes da correspondente equação mestra podem ser obtidos pela regra áurea de Fermi, sendo proporcionais aos elementos de matriz do operador posição. Obtemos então

$$\alpha = a(n + 1) \quad (2.77)$$

$$\beta = bn. \quad (2.78)$$

A equação mestra é dada por

$$\dot{P}_n(t) = b(n + 1)P_{n+1}(t) + anP_{n-1}(t) - (a(n + 1) + bn)P_n(t) \quad (2.79)$$

No equilíbrio, a derivada temporal da probabilidade se anula e obtemos

$$b(n + 1)P_{n+1}^e + anP_{n-1}^e - (a(n + 1) + bn)P_n^e = 0 \quad (2.80)$$

$$(n + 1)P_{n+1}^e + e^{-2\beta_T E_0} n P_{n-1}^e - (e^{-2\beta_T E_0} (n + 1) + n)P_n^e = 0 \quad (2.81)$$

onde usamos a condição de balanço detalhado

$$\frac{a}{b} = e^{-2\beta_T E_0} < 1. \quad (2.82)$$

Note que da definição (2.76) que vale a relação

$$e^{-2\beta_T E_0} P_n^e = P_{n+1}^e \quad (2.83)$$

Sem o conhecimento da função de partição, podemos resolver a condição de equilíbrio, expressando  $P_n^e$  em função de  $u = \frac{a}{b}$ . Obtemos

$$P_n^e = (1 - u)u^n. \quad (2.84)$$

Então, os dois primeiros termos da equação (2.81) ficam

$$(n + 1)P_{n+1}^e + e^{-2\beta_T E_0} n P_{n-1}^e = (n + 1)(1 - u)u^{n+1} + un(1 - u)u^{n-1} \quad (2.85)$$

$$(n + 1)(1 - u)u^{n+1} + un(1 - u)u^{n-1} = (u(n + 1) + n)P_n^e \quad (2.86)$$

Comparando com a equação (2.76) temos

$$(1 - u)u^n = \frac{e^{-\beta_T h\omega n} e^{-\beta_T h\omega/2}}{Z} \quad (2.87)$$

$$\Rightarrow Z = \frac{e^{-\beta_T h\omega/2}}{1 - e^{-\beta_T h\omega}} \quad (2.88)$$

que é consistente com a função de partição do oscilador harmônico. Concluimos que o processo de Pauli descreve corretamente a dinâmica de relaxamento do sistema ao equilíbrio por meio de saltos quânticos. Em geral, a solução do sistema de equações diferenciais obtida da equação mestra (2.65) bem complicada de resolver, principalmente quando a solução estacionária não é conhecida. Um dos objetivos desta dissertação é apresentar um procedimento que permite usar os diagramas de Petri do método de Baez para obtermos analiticamente a função geradora de processos estocásticos discretos.

Uma ferramenta importante para guiar o método analítico é a termodinâmica estocástica, que é essencialmente uma extensão dos conceitos da termodinâmica de equilíbrio, como entropia, calor e trabalho, para descrever o processo de relaxação ao equilíbrio de processos estocásticos. Neste contexto, a taxa de produção de entropia é uma grandeza central. Para ilustrar como funciona esta abordagem na prática, vamos generalizar um pouco nosso exemplo anterior. Suponha que temos a função  $P_j(t)$  para um sistema de osciladores harmônicos em contato com um reservatório de potencial químico  $\mu$ . Em analogia com a mecânica estatística podemos definir

$$\bar{E}(t) = \sum_j P_j(t) E_j \quad (2.89)$$

$$\bar{N}(t) = \sum_j P_j(t) N_j \quad (2.90)$$

como a energia média do sistema e o número médio de partículas, respectivamente. A condição de balanço detalhado pode ser escrita como uma condição sobre os elementos de matriz do operador  $H$  do método de Baez

$$\frac{H_{jk}}{H_{kj}} = \exp\{-\beta_T[E_j - E_k - \mu(N_j - N_k)]\} \quad (2.91)$$

Podemos escolher a entropia informacional de Shannon para expressar a entropia termodinâmica do sistema em um tempo arbitrário do processo

$$S(t) = -k_B \sum_j P_j(t) \ln P_j(t). \quad (2.92)$$

Aqui caberia criticar que esta escolha é essencialmente arbitrária, visto que não existe nenhuma fórmula geral para a entropia de um sistema fora do equilíbrio. Mas como veremos a seguir, esta escolha é consistente com todos os resultados conhecidos, tanto da termodinâmica de equilíbrio quanto da termodinâmica de não equilíbrio. A variação temporal desta entropia, como pode ser extensamente encontrado na literatura (SCHNAKENBERG, 1976)(ZIENER; MARITAN;

HINRICHSEN, 2015), é:

$$\dot{S}(t) = \Pi(t) - \Phi(t) \quad (2.93)$$

$$\Phi(t) = k_B \sum_{j,k} H_{jk} P_k(t) \ln \frac{H_{jk}}{H_{kj}}, \quad \forall H_{kj} \neq 0 \quad (2.94)$$

$$\Pi(t) = k_B \sum_{jk} H_{jk} P_k(t) \ln \frac{H_{jk} P_k(t)}{H_{kj} P_j(t)}, \quad \forall H_{kj} P_j(t) \neq 0 \quad (2.95)$$

onde  $\Pi(t)$  é a taxa de produção de entropia do sistema, que é sempre maior ou igual a zero, em consistência com a segunda lei da termodinâmica. O termo  $\Phi(t)$  é o fluxo de entropia, que neste caso caracteriza os processos de emissão e absorção dos osciladores harmônicos. Utilizando a condição de balanço detalhado em (2.94) podemos escrever

$$\Phi(t) = -\frac{\dot{Q}}{T}, \quad (2.96)$$

onde  $Q$  é o calor trocado pelos osciladores com o banho térmico. Portanto

$$\Pi(t) = \dot{S}(t) - \frac{\dot{Q}}{T}, \quad (2.97)$$

de onde vemos que  $\Pi(t)$  pode ser interpretado como a taxa total de produção de entropia do sistema no processo de relaxação ao equilíbrio com energia fornecida pelo reservatório. Note que no equilíbrio devemos ter um máximo na entropia e portanto  $\dot{S}(t) = 0$ .

Alguns trabalhos (ESPOSITO; SCHALLER, 2012) incluem a presença de um mecanismo de “feedback” ou retroalimentação, também chamados de demônios de Maxwell, que permitem mudar a condição de balanço detalhado e produzir uma variação artificial nas taxas de produção de entropia sem violar a segunda lei da termodinâmica e sem afetar o balanço de matéria ou energia. Estas possibilidades, apesar de fora do escopo desta dissertação, serão discutidas brevemente nas conclusões.

### 2.3 CONEXÃO ENTRE A TEORIA H E PROCESSOS ESTOCÁSTICOS DISCRETOS

Conforme vimos na introdução, a teoria H é usualmente apresentada na forma de um sistemas de equações diferenciais estocásticas acopladas. Apesar da solução estacionária ter sido calculada com sucesso, muito pouco é conhecido sobre o processo de relaxação. Grande parte da dificuldade resulta da quase impossibilidade de uma solução analítica para a dinâmica, ou seja a correspondente equação de Fokker-Planck. Em consequência, o estudo da termodinâmica estocástica correspondente fica comprometido. Um importante progresso foi feito em um trabalho muito recente <sup>3</sup>, onde foi apresentado um argumento baseado no teorema central do limite que reproduz os resultados da teoria H através de processos estocásticos discretos. Tendo em vista

<sup>3</sup> A.M.S. Macêdo, I.R.R. González, E.P. Raposo, L.S. Menezes, A.S.L. Gomes, Turbulent Intermittency in a Random Fiber Laser, *Atoms* 7(2), 43, 2019

a importância deste argumento para nossa dissertação, vamos reproduzir aqui brevemente os principais argumentos.

Considere um processo estocástico composto, onde definimos a variável aleatória

$$Y_n = \sum_{i=1}^n Z_i \quad (2.98)$$

$$Z_i = X_i - \bar{X}, \quad (2.99)$$

onde  $Z_i$  são variáveis aleatórias independentes e  $n$  é uma variável aleatória discreta que segue um processo estocástico descrito por uma equação mestra. Para o processo de Poisson temos uma distribuição do tipo

$$P(n) = \frac{\mu^n}{n!} e^{-\mu}; \quad \mu = \bar{n} \quad (2.100)$$

Definindo a função característica do processo composto como uma média ponderada, temos os seguintes resultados para um processo Poisson

$$\bar{\Phi}_Y(k) = \sum_{n=0}^{\infty} P(n) \Phi_{Y_n}(k) \quad (2.101)$$

$$\bar{\Phi}_Y(k) = \exp[\bar{n}(\Phi_Z(k) - 1)] \quad (2.102)$$

$$\Phi_Z(k) = \langle e^{ikz} \rangle \quad (2.103)$$

$$\Phi_{Y_n}(k) = [\Phi_Z(k)]^n. \quad (2.104)$$

Por hipótese

$$\Phi_Z(k) = 1 - \frac{k^2 \sigma_X^2}{2} + o(k^4). \quad (2.105)$$

Sem perder generalidade na definição de  $Z_i$  pode-se fazer  $Z_i \rightarrow \frac{Z_i}{n}$ , logo

$$\Phi_Z(k) = 1 - \frac{k^2 \sigma_X^2}{2n} + o(k^4) \quad (2.106)$$

e portanto

$$\bar{\Phi}_Y(k) \rightarrow \exp\left[-\frac{k^2}{2\sigma_X^2}\right], \quad n \rightarrow \infty. \quad (2.107)$$

Concluimos que escolhendo um processo Poisson para  $n$  resulta em uma distribuição gaussiana para  $Y$ . Por outro lado, escolhendo um processo binomial negativo, temos a solução estacionária

$$P(n) = C_n^{n+\nu-1} \frac{a^n}{(1+a)^{n+\nu}}, \quad \forall \nu \geq 1 \quad (2.108)$$

Aplicando a fórmula (2.68), obtemos a função geradora

$$F(z) = (1 - a(z-1))^{-\nu} \quad (2.109)$$

O valor médio de  $n$  é dado por

$$\bar{n} = \frac{dF(1-z)}{dz} \Big|_{z=0} = a\nu \quad (2.110)$$

Para a função característica da composição, obtemos

$$\bar{\Phi}_Y(k) = \left(1 - \frac{\bar{n}}{\nu}(\Phi_Z(k) - 1)\right)^{-\nu} \quad (2.111)$$

que, após tomarmos o limite  $\bar{n} \rightarrow \infty$ , resulta em

$$\bar{\Phi}_Y(k) = \left(1 + \frac{k^2}{2\nu\sigma_X^2}\right)^{-\nu} \quad (2.112)$$

Usando a definição da função G de Meijer (COSTA, 2012):

$$G_{p,q}^{m,n} \left( z \left| \begin{matrix} a_1, \dots, a_p \\ b_1, \dots, b_q \end{matrix} \right. \right) = \frac{1}{2\pi i} \int_L R(s)^{-s} ds \quad (2.113)$$

$$R(s) = \frac{\prod_{k=1}^m \Gamma(b_k + s) \prod_{j=1}^n \Gamma(1 - a_j - s)}{\prod_{k=m+1}^q \Gamma(1 - b_k - s) \prod_{j=n+1}^p \Gamma(a_j + s)} \quad (2.114)$$

vemos que

$$(1+x)^{-\nu} = \frac{1}{\Gamma(\nu)} G_{1,1}^{1,1} \left( \begin{matrix} 1-\nu \\ 0 \end{matrix} \middle| x \right) \quad (2.115)$$

e portanto

$$\bar{\Phi}_Y(k) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} G_{1,1}^{1,1} \left( \begin{matrix} 1-\nu \\ 0 \end{matrix} \middle| \frac{k^2}{2\nu\sigma_X^2} \right) \quad (2.116)$$

que é o resultado obtido na teoria H contínua para um nível na hierarquia ( $N = 1$ ), veja (1.4). Pode-se generalizar este procedimento para uma hierarquia de  $N$  níveis. O resultado para a função característica do processo composto é

$$\bar{\Phi}_Y(k) = \frac{1}{\Gamma(\vec{\nu})} G_{N,1}^{1,N} \left( \begin{matrix} \vec{1} - \vec{\nu} \\ 0 \end{matrix} \middle| \frac{k^2}{2\nu\sigma_X^2} \right), \quad \nu = \prod_j \nu_j. \quad (2.117)$$

A correspondente função geradora é

$$F(z) = \frac{1}{\Gamma(\vec{\nu})} G_{N,1}^{1,N} \left( \begin{matrix} \vec{1} - \vec{\nu} \\ 0 \end{matrix} \middle| a(1-z) \right). \quad (2.118)$$

De onde obtemos a distribuição estacionária para  $N$  arbitrário

$$P_n = \frac{1}{n! \Gamma(\vec{\nu})} G_{N,1}^{1,N} \left( \begin{matrix} \vec{1} - \vec{\nu} \\ n \end{matrix} \middle| a \right) \quad (2.119)$$

É fácil ver que os casos anteriores podem ser obtidos desta formula geral. Por exemplo, para  $N = 0$  temos

$$P_n = \frac{1}{n!} G_{0,1}^{1,0} \left( - \middle| a \right) = \frac{a^n e^{-a}}{n!}, \quad (2.120)$$

e para  $N = 1$ , obtemos

$$P_n = \frac{1}{n! \Gamma(\nu)} G_{1,1}^{1,1} \left( 1 - \nu \middle| a \right) = \frac{\Gamma(n + \nu)}{n! \Gamma(\nu)} \left( \frac{a}{1 + a} \right)^n \left( \frac{1}{1 + a} \right)^\nu \quad (2.121)$$

que são as distribuições estacionárias dos processos de Poisson e binomial negativo respectivamente.

A recursividade destas distribuições, que evidencia a hierarquia, é mais evidente na sua representação integral. Neste ponto entra o peso da distribuição gamma que acopla os processos de forma exata nas distribuições no equilíbrio. Seja a função geradora da distribuição de Poisson

$$F(z) = e^{a(z-1)} \quad (2.122)$$

e considere a distribuição gama

$$\gamma(\theta) = \frac{\theta^{\nu-1}}{\tau^\nu \Gamma(\nu)} e^{-\frac{\theta}{\tau}}. \quad (2.123)$$

Introduzindo a composição diretamente na função geradora

$$G(z) = \int_0^\infty \gamma(\theta) e^{\theta(z-1)} d\theta \quad (2.124)$$

obtemos

$$G(z) = (1 + \tau(z - 1))^{-\nu}. \quad (2.125)$$

Note que tomando o limite  $\tau \rightarrow -a$  após a integração<sup>4</sup>, obtemos a função geradora da distribuição binomial negativa, como pode ser comprovado aplicando a propriedade (2.69) de onde sai a equação (2.121). Comparando com a equação (1.1) notamos que  $a = \epsilon_0/\beta$ .

No próximo capítulo, vamos mostrar como usar o método de Baez para calcular analiticamente a taxa de produção de entropia de processos estocásticos discretos, com foco principal no processo binomial negativo. A hipótese principal subjacente é que tomando o limite  $\bar{n} \rightarrow \infty$  poderemos em princípio obter a taxa de produção de entropia da teoria H.

<sup>4</sup> Do ponto de vista matemático, isto requer uma continuação analítica.

### 3 PRODUÇÃO DE ENTROPIA EM PROCESSOS DE MARKOV

Vários sistemas físicos podem ser descritos como processos de Markov, por exemplo, um oscilador harmônico acoplado a um campo de radiação possui probabilidades de transição nos dois sentidos: emissão e absorção. Uma abordagem simples e elegante para a dinâmica deste sistema é a de Lindblad (BONDAREV, 2017)(BONDAREV, 2013), com a qual podemos descrever a evolução temporal da matriz densidade devido às transições. Uma característica desta construção é a possibilidade de estabelecer uma relação entre as taxas de probabilidade das transições com o correspondente problema termodinâmico, que no caso citado são proporcionais a  $\exp[-\hbar\omega/2k_B T]$  e  $\exp[\hbar\omega/2k_B T]$  para emissão e absorção respectivamente. Estes valores ficam perto de 1 a temperaturas relativamente baixas e para energias na ordem do infravermelho. Nos gráficos que apresentaremos neste capítulo escolheremos valores de taxas que, apesar de arbitrários, não ficam longe de vários exemplos de sistemas físicos reais.

Vimos no capítulo anterior, que um sistema hierárquico pode ser facilmente construído a partir de um processo simples como o processo de Poisson. Um exemplo prático disto é um sistema quântico com dupla barreira de potencial. A distribuição das partículas que pulam de um canto para outro por efeito túnel está determinada pelas propriedades da barreira e do reservatório considerado. Considerando duas barreiras, o espaço entre as duas vira um reservatório efetivo para o destino final. Processos binomiais negativos (BN) e a sua construção matemática foram estudados em (KOZUBOWSKI; PODGORSKI, 2009) para diferentes situações, das quais podemos mencionar:

- O tempo de espera até o  $\nu$ -ésimo evento acontecer, medido como fracasso.
- A distribuição da mistura de processos de Poisson que tem como distribuição de seus valores médios uma função gamma com parâmetro  $\theta > 0$ .
- A distribuição no equilíbrio de um processo de Markov com taxa de probabilidades  $\alpha$  e  $\beta$ ,  $\alpha > \beta$  e com probabilidade de Bernoulli  $\beta/\alpha$ .

Neste mesmo estudo uma composição exata do processo BN com processos de Poisson é considerada.

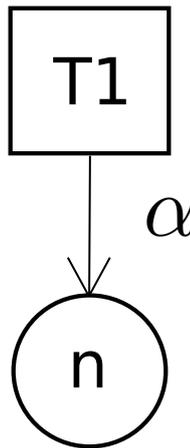
A abordagem termodinâmica para sistemas complexos foi desenvolvida usando o princípio da entropia máxima em (VASCONCELOS; SALAZAR; MACÊDO, 2017), assim como outras construções (TSALLIS; SOUZA, 2003), usualmente aplicando o teorema central do limite para obter distribuições estacionárias. A teoria H proporciona explicitamente as distribuições do equilíbrio local dos subsistemas na forma de uma hierarquia, como especificado anteriormente. Neste sentido, é válido considerar os processos discretos associados às distribuições dos subsistemas e analisá-los termodinamicamente fora do equilíbrio com as ferramentas adequadas (TOMÉ,

2006). Isto permitiria, entre outras coisas, caracterizar os processos de relaxação da teoria H através de expressões analíticas para as taxas de produção de entropia. Neste capítulo, vamos mostrar como isto pode ser feito exatamente para os dois primeiros elementos da hierarquia, que são os casos dos processos Poisson ( $N = 0$ ) e binomial negativo ( $N = 1$ ) respectivamente. Finalizaremos com uma proposta de uma abordagem aproximada para o cálculo da taxa de produção de entropia dos demais processos da hierarquia ( $N > 1$ ).

### 3.1 PROCESSO DE POISSON

Usando o método de Baez apresentado na seção 2.1.5, podemos obter o diagrama de Petri para um processo unidirecional com uma dada taxa de probabilidade de transição. A figura 3.1 mostra o diagrama obtido, onde  $\alpha$  é a taxa de probabilidade de transição do processo.

**Figura 3** – Diagrama de Petri de um processo de Poisson. O bloco T1 representa a transição e o círculo a espécie  $n$ .



Fonte: O autor(2020)

O diagrama mostra uma fonte inesgotável da espécie  $n$ , e T1 representa a transição que dá lugar ao processo, o qual é representado pelo Hamiltoniano da equação mestra do diagrama. Como se viu na seção 2.1.5, T1 apresenta apenas uma entrada para uma mesma espécie. Uma representação dinâmica do processo pode ser vista nas figuras 4a e 4b com o tempo aumentando do item a) para o b).

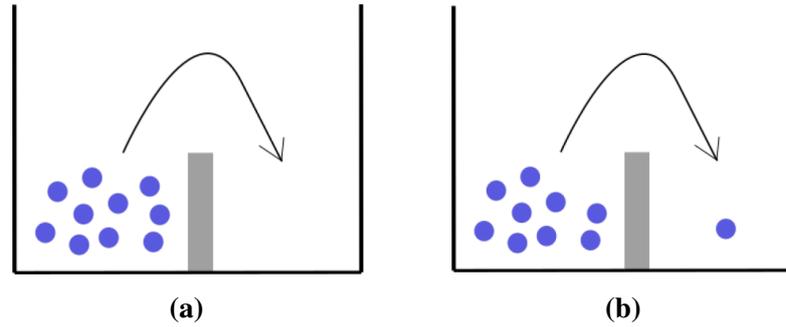
Logo, aplicando as regras do método de Baez, podemos escrever

$$H = \alpha(n^+ - 1) \quad (3.1)$$

Isto implica que a equação de evolução para a função geradora do processo de Poisson é

$$\frac{dF(z, t)}{dt} = \alpha(n^+ - 1)F(z, t). \quad (3.2)$$

**Figura 4** – Representação dinâmica do processo de Poisson.



Fonte: O autor(2020)

Note que por definição  $F(z, t)$  pode ser expandida como

$$F(z, t) = \sum_{k=0}^N P_k(t) z^k, \quad (3.3)$$

o que implica que a probabilidade  $P_n(t)$  pode ser obtida a partir de  $F(z, t)$  como:

$$P_n(t) = \frac{1}{n!} \frac{d^n}{dz^n} F(z, t) \Big|_{z=0} \quad (3.4)$$

Para resolver a equação diferencial (3.2) precisamos primeiro definir a condição inicial, ou seja  $P_n(0)$ . Sem perda de generalidade, podemos assumir que no começo do nosso experimento estocástico temos uma quantidade nula da espécie. Isto quer dizer que a probabilidade de achar  $n = 0$  espécies no instante de tempo  $t = 0$  é exatamente 1, ou seja  $P_0(0) \equiv 1$ . Logo, a nossa função geradora terá valor  $F(z, 0) = 1$ . Note então que  $n^+ F(z, t) = z F(z, t)$ , e portanto a equação diferencial (3.2) pode ser facilmente resolvida pelos passos abaixo

$$\frac{dF(z, t)}{dt} = \alpha(z - 1)F(z, t) \quad (3.5)$$

$$\frac{dF(z, t)}{F(z, t)} = \alpha(z - 1)dt \quad (3.6)$$

$$\ln F(z, t) = \alpha(z - 1)t \quad (3.7)$$

$$F(z, t) = \exp[\alpha t(z - 1)]. \quad (3.8)$$

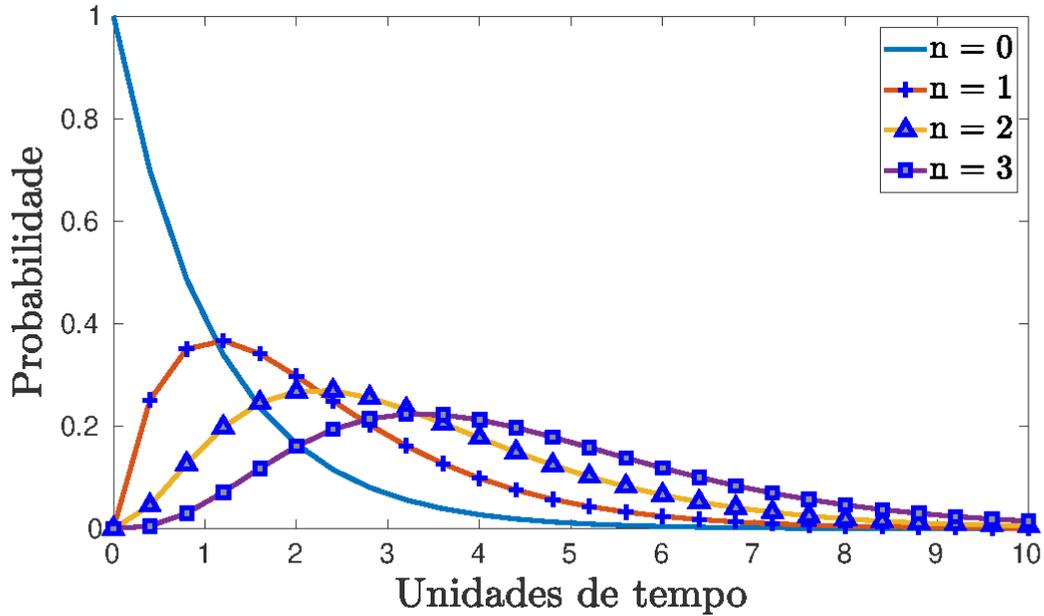
$$(3.9)$$

Aplicando a fórmula (3.4) na equação (3.9) obtemos

$$P_n(t) = \frac{(\alpha t)^n e^{-\alpha t}}{n!} \quad (3.10)$$

Na figura 5 mostramos a evolução temporal desta solução. Podemos agora escrever uma equação

**Figura 5** – Evolução temporal do processo de Poisson, em unidades arbitrárias de tempo para  $\alpha = 0.9$ .



Fonte: O autor(2020)

mestra para a probabilidade (3.10). Inicialmente, vamos definir

$$\mathbb{P}^+ f(n) = f(n + 1) \quad (3.11)$$

$$\mathbb{P}^- f(n) = f(n - 1) \quad (3.12)$$

$$\Rightarrow \sum_{n=0}^{N-1} g(n) \mathbb{P}^+ f(n) = \sum_{n=1}^N f(n) \mathbb{P}^- g(n), \quad (3.13)$$

onde  $f(n)$  é uma função arbitrária. Substituindo (3.3) em (3.2), obtemos:

$$\sum_{k=0}^N z^k \frac{dP_k(t)}{dt} = \alpha \sum_{k=0}^N (n^+ - 1) z^k P_k(t) \quad (3.14)$$

$$\Rightarrow \sum_{k=0}^N z^k \frac{dP_k(t)}{dt} = \alpha \sum_{k=0}^N (z^{k+1} - z^k) P_k(t) \quad (3.15)$$

Usando<sup>1</sup> (3.11),

$$\sum_{k=0}^N z^k \frac{dP_k(t)}{dt} = \alpha \sum_{k=0}^N P_k(t) (\mathbb{P}^+ - 1) z^k \quad (3.16)$$

<sup>1</sup> É importante esclarecer que esta soma pode se dividir em duas e a soma total faz sentido apenas para os índices definidos de  $P_k$ . Por conveniência, vamos fixar os limites  $k \in [0, N]$  em todas as somas, ver apêndice A.

e aplicando a propriedade (3.13) obtemos

$$\sum_{k=0}^N z^k \frac{dP_k(t)}{dt} = \alpha \sum_{k=0}^N z^k (\mathbb{P}^- - 1) P_k(t) \quad (3.17)$$

Finalmente, a equação mestra é dada por

$$\frac{dP_k(t)}{dt} = \alpha (\mathbb{P}^- - 1) P_k(t) \quad (3.18)$$

que também pode ser escrita como

$$\frac{dP_n(t)}{dt} = \alpha (P_{n-1}(t) - P_n(t)) \quad (3.19)$$

que é a sua forma tradicional. O termo  $\alpha(\mathbb{P}^- - 1)$  é o operador Hamiltoniano desta equação mestra, o qual denotaremos  $\mathbb{H}_p$  a partir de agora.

### 3.1.1 Representação matricial da equação mestra

A equação mestra (3.19) representa um sistema de equações diferenciais, que pode ser escrito explicitamente como

$$\begin{aligned} \dot{P}_0(t) &= -\alpha P_0(t) \\ \dot{P}_1(t) &= \alpha P_0(t) - \alpha P_1(t) \\ \dot{P}_2(t) &= \alpha P_1(t) - \alpha P_2(t) \\ \dot{P}_3(t) &= \alpha P_2(t) - \alpha P_3(t) \\ &\vdots \\ \dot{P}_n(t) &= \alpha (P_{n-1}(t) - P_n(t)) \end{aligned} \quad (3.20)$$

Alternativamente, podemos usar a representação matricial

$$\begin{bmatrix} \dot{P}_0(t) \\ \dot{P}_1(t) \\ \dot{P}_2(t) \\ \dot{P}_3(t) \\ \dot{P}_4(t) \\ \vdots \end{bmatrix}_{n \times 1} = \begin{bmatrix} -\alpha & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \alpha & -\alpha & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \alpha & -\alpha & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \end{bmatrix}_{n \times n} \begin{bmatrix} P_0(t) \\ P_1(t) \\ P_2(t) \\ P_3(t) \\ P_4(t) \\ \vdots \end{bmatrix}_{n \times 1} \quad (3.21)$$

de modo que identificamos a matriz hamiltoniana como

$$\mathbb{H}_p = \begin{bmatrix} -\alpha & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \alpha & -\alpha & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \alpha & -\alpha & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \alpha & -\alpha & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \end{bmatrix}_n. \quad (3.22)$$

Note que agora temos uma equação matricial com a seguinte estrutura <sup>1</sup>

$$\begin{bmatrix} \dot{P}_0(t) \\ \dot{P}_1(t) \\ \dot{P}_2(t) \\ \dot{P}_3(t) \\ \vdots \end{bmatrix}_{n \times 1} = \mathbb{H}_{p(n \times n)} \begin{bmatrix} P_0(t) \\ P_1(t) \\ P_2(t) \\ P_3(t) \\ \vdots \end{bmatrix}_{n \times 1} \quad (3.23)$$

Comparando com a equação (3.18) obtemos a representação matricial do operador  $\mathbb{P}^-$  e por consequência o operador conjugado  $\mathbb{P}^+$ :

$$\mathbb{P}^- = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \end{bmatrix}_n \Rightarrow \mathbb{P}^+ = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}_n. \quad (3.24)$$

### 3.2 PROCESSO BINOMIAL NEGATIVO

A distribuição binomial negativa é uma distribuição discreta de probabilidade obtida a partir de uma série de experimentos de Bernoulli <sup>2</sup>. Ela difere da distribuição binomial, que exige um número fixo de sucessos ou fracassos (dependendo do escolhido). O nome de “negativa” vem precisamente da possibilidade de distribuir eventos de “fracasso” ou “sucesso” usando uma fórmula binomial com parâmetro negativo. Note que “sucesso” ou “fracasso” são termos ambíguos e não se referem necessariamente aos conceitos certo ou errado. Doravante eles serão referenciados apenas como eventos, ou resultados dos experimentos,  $\bar{\mathbf{A}}$ , cujas frequências desejamos comparar uma série de eventos complementares  $\bar{\bar{\mathbf{A}}} = \mathbf{A}$ . Usaremos o sinal clássico ( $\bar{\quad}$ ) da lógica formal para diferenciar eventos mutuamente excludentes.

<sup>1</sup> Note que os índices foram colocados apenas para a operação matricial.

<sup>2</sup> Um experimento de Bernoulli é aquele que só pode ter dois resultados excludentes.

**Definição 3.1.** *Considere um experimento de Bernoulli com os possíveis resultados  $\mathbf{A}$  e  $\bar{\mathbf{A}}$ . A probabilidade de acontecer  $\bar{\mathbf{A}}$  será denotada por  $\Lambda$  e a probabilidade de  $\mathbf{A}$  será  $1 - \Lambda$ .*

*A probabilidade de acontecer  $n$  eventos  $\bar{\mathbf{A}}$  dados  $\nu$  eventos  $\mathbf{A}$  é fornecida por uma distribuição binomial negativa*

$$P_n = C_n^{n+\nu-1} \Lambda^n (1 - \Lambda)^\nu \quad (3.25)$$

, onde  $C_y^x$  representa a combinatória sem repetição de  $x$  em  $y$ , ou seja

$$C_n^{n+\nu-1} = \frac{(n + \nu - 1)!}{n!(\nu - 1)!} \quad (3.26)$$

Outras possibilidades são igualmente válidas. Por exemplo, se quisermos achar a distribuição de  $N$  experimentos, dados  $\nu$  eventos  $\mathbf{A}$ , então teríamos

$$P_N = C_{N-\nu}^{N-1} \Lambda^{N-\nu} (1 - \Lambda)^\nu \quad (3.27)$$

Note que fazendo a substituição  $N = n + \nu$  recuperamos a expressão (3.25).

Usemos agora o método de Baez para obter a equação mestra do processo binomial negativo. Note que a solução estacionária da equação mestra deve coincidir com (3.25). Vamos começar construindo os diagramas de Petri. Como os experimentos de Bernoulli mencionados anteriormente acontecem até se chegar a um número  $\nu$  de eventos  $\mathbf{A}$ , então podemos considerar  $\nu$  constante para um mesmo diagrama. De fato, esta é uma característica importante que a diferencia de outras distribuições, como a binomial por exemplo. Logo, podemos partir desse número para obter a probabilidade de  $n$  eventos  $\bar{\mathbf{A}}$  que é a variável estocástica do processo.

Primeiramente, devemos especificar qual é ou são a espécie ou as espécies do problema. A primeira ideia pode ser, talvez, nomear o evento  $\mathbf{A}$  como uma espécie e o evento  $\bar{\mathbf{A}}$  como outra, escolha que deixaria um diagrama simples mas com uma equação de operadores “levantamento” e “abaixamento” bem mais complicada. Na prática é bom notar que os eventos de Bernoulli são excludentes e em uma distribuição binomial negativa o número de eventos  $\mathbf{A}$  é dado, ou seja constante para cada processo. Logo, sabendo o número de eventos totais e o número de eventos  $\mathbf{A}$  dados, é possível conhecer a frequência de eventos  $\bar{\mathbf{A}}$ . Então, uma escolha conveniente é tomar como espécie o resultado do experimento de Bernoulli  $\bar{\mathbf{A}}$ , dados  $\nu$  eventos  $\mathbf{A}$ , sendo  $\mathbf{A}$  o último evento observado. De forma mais geral, temos 3 abordagens que levam a diagramas equivalentes:

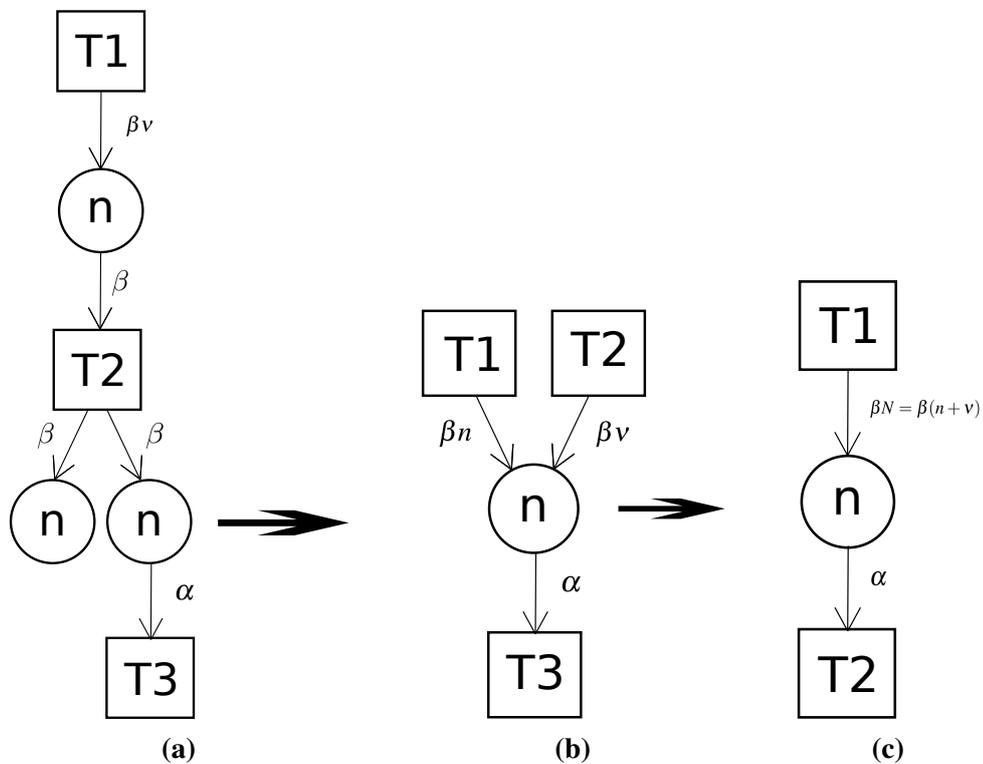
1. São criados  $\nu$  eventos inicialmente, o que garante que a sua quantidade é constante. Para isto, atribuímos uma taxa de  $\nu\beta$ . Em seguida é preciso criar mais eventos até chegar a um total de  $N$ , porém sem mexer na quantidade anteriormente criada. O truque está em tirar

um evento dos anteriores e criar dois. Finalmente, coloca-se uma taxa de controle para o novo evento criado.

2. Se é possível criar todos os eventos  $A$  de uma vez e consecutivamente ir tirando eventos até se chegar ao número  $\nu$ , isto automaticamente distribui os eventos  $\bar{A}$ .
3. Igual que no item anterior mas agora fatorizado em apenas duas transições (ver figura 3.3).

Os diagramas correspondentes aos itens 1, 2 e 3 seriam as figuras 6a, 6b e 6c respectivamente. Note que tem uma fatoração na figura 6a em relação à figura 6c e que todos diagramas são equivalentes, no sentido que produzem a mesma equação mestra.

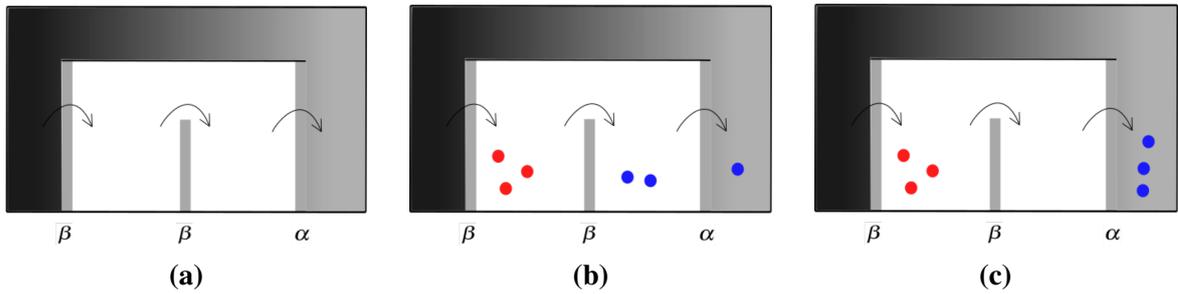
**Figura 6** – Diagramas equivalentes de Petri do processo binomial negativo.



Fonte: O autor(2020)

Igual que no caso anterior nas figuras 7a até 7c, no mesmo sentido do incremento temporal, se pode ver a representação dinâmica do processo em 3 fases:

- Preenche-se o primeiro espaço com  $\nu$  eventos.
- O segundo espaço começa se preencher mantendo constante o valor de  $\nu$ .
- É contabilizado o número de partículas( $n$ ) que conseguem atravessar todos os espaços.

**Figura 7** – Representação dinâmica do processo Binomial Negativo.

Fonte: O autor(2020)

Tendo o diagrama de Petri, podemos usar o método de Baez para escrever a equação diferencial da função geradora do processo binomial negativo. Tomando a figura 6b como exemplo, obtemos

$$\frac{dF(z, t)}{dt} = \beta\nu(n^+ - 1)F(z, t) + \beta n(n^+ - 1)F(z, t) + \alpha(n^- - n^+n^-)F(z, t) \quad (3.28)$$

Note que a soma do primeiro com o segundo termo dão imediatamente o diagrama fatorado da figura 6c. Usando a definição dos operadores de levantamento ( $n^+$ ) e abaixamento ( $n^-$ ), temos as equações

$$\begin{aligned} n^+ F(z, t) &= zF(z, t) \\ n^- F(z, t) &= \frac{\partial F(z, t)}{\partial z}, \end{aligned} \quad (3.29)$$

que permitem escrever a equação diferencial para a função geradora na forma

$$\frac{\partial F(z, t)}{\partial t} = \beta\nu(z - 1)F(z, t) + [\beta z^2 + \alpha - (\alpha + \beta)z] \frac{\partial F(z, t)}{\partial z} \quad (3.30)$$

ou

$$\frac{\partial F(z, t)}{\partial t} + [(\alpha + \beta)z - \alpha - \beta z^2] \frac{\partial F(z, t)}{\partial z} + (1 - z)\beta\nu F(z, t) = 0. \quad (3.31)$$

A solução analítica desta equação será obtida na próxima seção.

### 3.2.1 Função geradora do processo BN

Um método para encontrar a solução analítica de (3.31)(método das curvas características) pode ser achado, por exemplo, em (Vam Kampen, 2007)(SPIEGEL, 1974)(FARLOW, 1993). Para o nosso caso particular, devemos proceder da seguinte forma. Inicialmente, vamos escrever a equação (3.31) na forma

$$A \frac{\partial F(z, t)}{\partial t} + K \frac{\partial F(z, t)}{\partial z} + QF(z, t) + R = 0, \quad (3.32)$$

onde

$$A = 1 \quad (3.33)$$

$$K = [(\alpha + \beta)z - \alpha - \beta z^2]$$

$$Q = (1 - z)\beta\nu$$

$$R = 0$$

Suponha agora que possamos parametrizar  $t(s)$  e  $z(s)$ , tal que  $F(z, t) = F(z(s), t(s))$ . Isto implica que podemos fazer as seguintes manipulações

$$\frac{dF(z, t)}{ds} = \frac{\partial F(z, t)}{\partial z} \frac{dz}{ds} + \frac{\partial F(z, t)}{\partial t} \frac{dt}{ds} = -QF(z, t) \quad (3.34)$$

$$\Rightarrow \frac{dt}{ds} = 1 \quad (3.35)$$

$$\Rightarrow \frac{dz}{ds} = (\alpha + \beta)z - \alpha - \beta z^2 \quad (3.36)$$

$$\Rightarrow dt = \frac{dz}{(\alpha + \beta)z - \alpha - \beta z^2} \quad (3.37)$$

Integrando ambos os lados de (3.37) obtemos

$$C_1 = \frac{z - 1}{z - \Lambda^{-1}} e^{(\beta - \alpha)t}, \quad (3.38)$$

onde  $C_1$  é a constante de integração, que é diferente para cada par  $(z, t)$ . Além disso,

$$\Lambda^{-1} = \frac{\alpha}{\beta} \quad (3.39)$$

Vamos achar agora uma curva característica de  $C_1$  ou uma solução particular de  $F(z, t)$ . Tomemos  $t = t_i$ , então

$$\begin{aligned} \frac{dF(z, t)}{ds} \Big|_{t_i} &= \frac{dF(z, t)}{dz} K \Big|_{t_i} = -QF(z, t) \Big|_{t_i} \\ \Rightarrow \frac{dF_i}{F_i} &= -\frac{Q}{K} dz \\ \Rightarrow d(\ln F_i) &= \frac{\beta\nu(z - 1)}{(\alpha + \beta)z - \alpha - \beta z^2} \end{aligned} \quad (3.40)$$

integrando, obtemos

$$F_i = (\beta z - \alpha)^{-\nu} C_i \quad (3.41)$$

Essa constante  $C_i$  deve depender de  $z$  e do  $t_i$  e dado que se conhece a relação de  $z$  com  $t$  (3.38), então podemos escrever

$$C(z, t) = C(C_1(z, t)) = C\left(\frac{z-1}{z-\Lambda^{-1}}e^{(\beta-\alpha)t}\right) \quad (3.42)$$

Analisemos agora a condição inicial de  $P_n(t)$

$$P_n(0) = \delta_{nm} \quad (3.43)$$

$$\Rightarrow F(z, 0) = \sum z^n P_n(0) = 1 \quad (3.44)$$

$$\Rightarrow (\beta z - \alpha)^{-\nu} C\left(\frac{z-1}{z-\Lambda^{-1}}\right) = 1 \quad (3.45)$$

$$\Rightarrow C\left(\frac{z-1}{z-\Lambda^{-1}}\right) = \beta^\nu (z - \Lambda^{-1})^\nu \quad (3.46)$$

Fazendo agora as mudanças de variáveis

$$\rho = \frac{z-1}{1-\Lambda^{-1}} \quad (3.47)$$

$$z = \frac{\rho\Lambda^{-1}-1}{\rho-1} \quad (3.48)$$

$$\varepsilon = e^{(\beta-\alpha)t} \quad (3.49)$$

e substituindo (3.47) e (3.48) em (3.46) obtemos

$$\Rightarrow C(\rho) = \beta^\nu \left(\frac{\rho\Lambda^{-1}-1}{\rho-1} - \Lambda^{-1}\right)^\nu \quad (3.50)$$

$$\Rightarrow C(\rho) = \beta^\nu \left(\frac{\Lambda^{-1}-1}{\rho-1}\right)^\nu. \quad (3.51)$$

Substituindo agora a equação (3.47) vezes a equação (3.49) no lugar de  $\rho$ , que é a solução para todo  $t$ , obtemos o seguinte produto:

$$C(z, t) = \beta^\nu (\Lambda^{-1} - 1)^\nu (z - \Lambda^{-1})^\nu (z(\varepsilon - 1) + \Lambda^{-1} - \varepsilon)^{-\nu}. \quad (3.52)$$

Portanto, ,

$$F(z, t) = \beta^{-\nu} (z - \Lambda^{-1})^{-\nu} C(z, t) \quad (3.53)$$

$$\Rightarrow F(z, t) = (\Lambda^{-1} - 1)^\nu (z(\varepsilon - 1) + \Lambda^{-1} - \varepsilon)^{-\nu} \quad (3.54)$$

Em suma, ,

$$F(z, t) = (1 - \Lambda)^\nu (z\Lambda(\varepsilon - 1) + 1 - \varepsilon\Lambda)^{-\nu} \quad (3.55)$$

$$F(z, t) = \left(\frac{1 - \Lambda}{1 - \Lambda(z(1 - \varepsilon) - \varepsilon)}\right)^\nu \quad (3.56)$$

é a solução analítica final para a função geradora  $F(z, t)$ .

### 3.2.1.1 Probabilidade do processo BN

Para achar a distribuição de probabilidades do processo BN, basta aplicar a fórmula (3.4) na equação (3.56), de onde sai imediatamente:

$$P_n(t) = \frac{1}{n!} (1 - \Lambda)^\nu \frac{\partial^n}{\partial z^n} [(z\Lambda(\varepsilon - 1) + 1 - \varepsilon\Lambda)^{-\nu}]|_{z=0} \quad (3.57)$$

$$P_n(t) = \frac{1}{n!} (1 - \Lambda)^\nu [\Lambda(\varepsilon - 1)]^n \frac{\partial^n}{\partial z^n} [(z + 1 - \varepsilon\Lambda)^{-\nu}]|_{z=0} \quad (3.58)$$

Defina

$$I = \frac{\partial^n}{\partial z^n} [(z + 1 - \varepsilon\Lambda)^{-\nu}], \quad (3.59)$$

então

$$I = (-\nu)(-\nu - 1)\dots(-\nu - (n - 1))[z + 1 - \varepsilon\Lambda]^{-\nu-n} \quad (3.60)$$

$$\Rightarrow I = (-1)^n \frac{(\nu + n - 1)!}{(\nu - 1)!} [z + 1 - \varepsilon\Lambda]^{-\nu-n}. \quad (3.61)$$

Logo

$$P_n(t) = \frac{1}{n!} (1 - \Lambda)^\nu [\Lambda(\varepsilon - 1)]^n (-1)^n \frac{(\nu + n - 1)!}{(\nu - 1)!} [z + 1 - \varepsilon\Lambda]^{-\nu-n}|_{z=0} \quad (3.62)$$

$$P_n(t) = \frac{(\nu + n - 1)!}{(\nu - 1)! n!} (1 - \Lambda)^\nu \Lambda^n (1 - \varepsilon)^n (1 - \varepsilon\Lambda)^{-\nu-n}. \quad (3.63)$$

Substituindo a equação (3.25), obtemos como solução geral:

$$P_n(t) = P_n^{est} (1 - \varepsilon)^n (1 - \varepsilon\Lambda)^{-\nu-n} \quad (3.64)$$

que é mostrada na figura 8. É importante notar que  $\nu$  é uma constante arbitrária, cujo domínio até agora não foi definido, exceto pela condição de ser maior que 0. Uma forma mais explícita de escrever a equação (3.64) seria:

$$P_n(t) = \frac{\Gamma(\nu + n)}{\Gamma(\nu)n!} (1 - \Lambda)^\nu \Lambda^n (1 - \varepsilon)^n (1 - \varepsilon\Lambda)^{-\nu-n} \quad (3.65)$$

onde usamos a forma explícita da solução estacionária:

$$P_n^{est} = \frac{\Gamma(\nu + n)}{\Gamma(\nu)n!} (1 - \Lambda)^\nu \Lambda^n \quad (3.66)$$

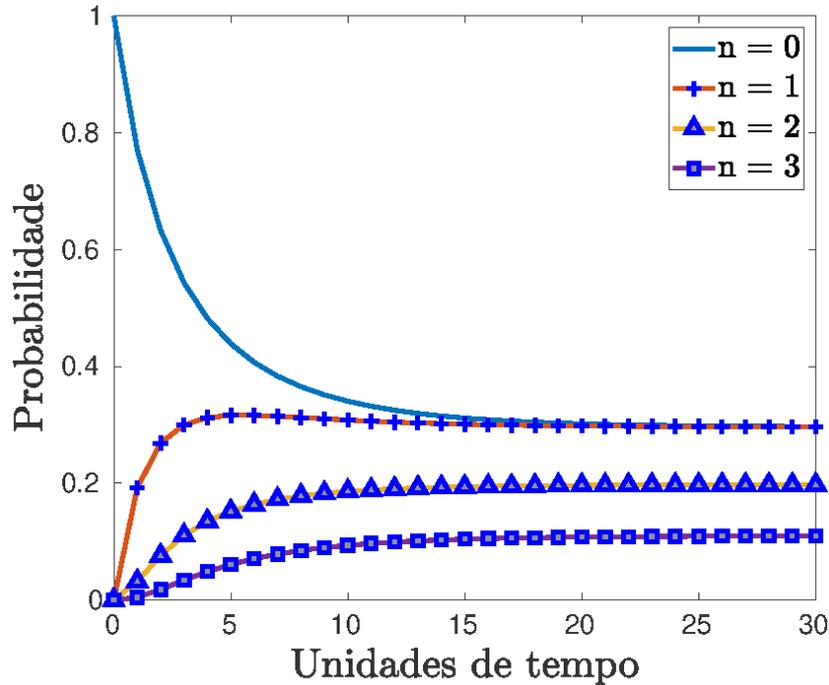
Note que a equação (3.65) pode ser interpretada como uma distribuição binomial com parâmetros dependentes do tempo. Definindo

$$\Lambda(t) = \frac{\Lambda(1 - \varepsilon)}{1 - \varepsilon\Lambda} \quad (3.67)$$

obtemos

$$P_n(t) = \frac{\Gamma(\nu + n)}{\Gamma(\nu)n!} [1 - \Lambda(t)]^\nu [\Lambda(t)]^n \quad (3.68)$$

**Figura 8** – Probabilidades do processo BN em unidades de tempo arbitrárias para os 4 primeiros valores de  $n$ . Valores do parâmetros escolhidos:  $\alpha = 0.3$ ,  $\beta = 0.1$  e  $\nu = 3$ .



Fonte: O autor(2020)

### 3.2.1.2 Análise dos valores limites

A solução (3.64) deve satisfazer às condições de contorno impostas. Quando  $t = \infty$  deve ser idêntica à equação estacionária (3.25), e quando  $t = 0 \Rightarrow P_n(0) = \delta_{n,0}$  com se viu ao começo dessa seção. Note que no primeiro caso, quando fazemos  $t \rightarrow \infty \Rightarrow \varepsilon \rightarrow 0$  na equação (3.64) obtemos

$$P_n(t \rightarrow \infty) = P_n^{est} (1 - (\varepsilon \rightarrow 0))^n (1 - (\varepsilon \rightarrow 0)\Lambda)^{-\nu-n}, \quad (3.69)$$

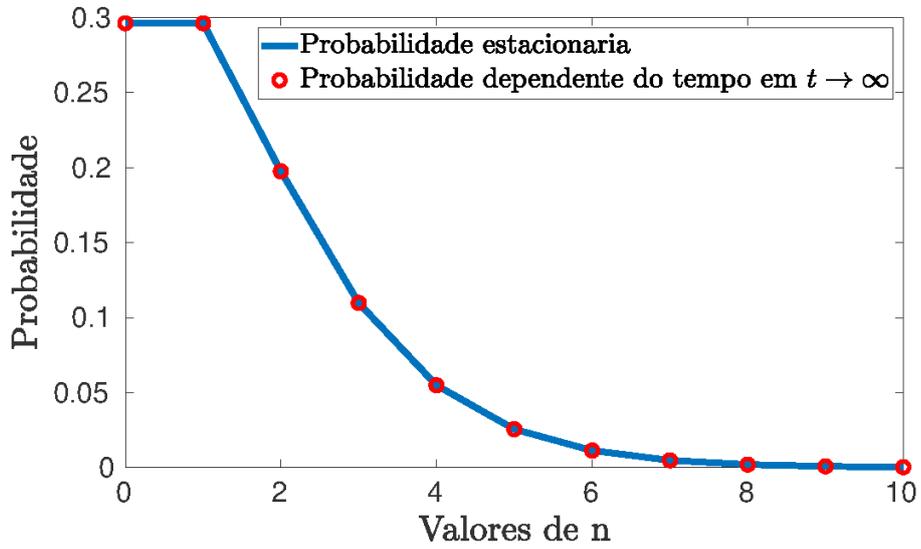
como esperado.

Na figura 9, mostramos a distribuição estacionária 3.25 (linha azul) e a distribuição dinâmica 3.64 (círculos vermelhos) para  $t \gg 1$ . A relaxação do processo é ilustrada na figura 3.6.

Para  $t \rightarrow 0 \Rightarrow \varepsilon \rightarrow 1$ , temos

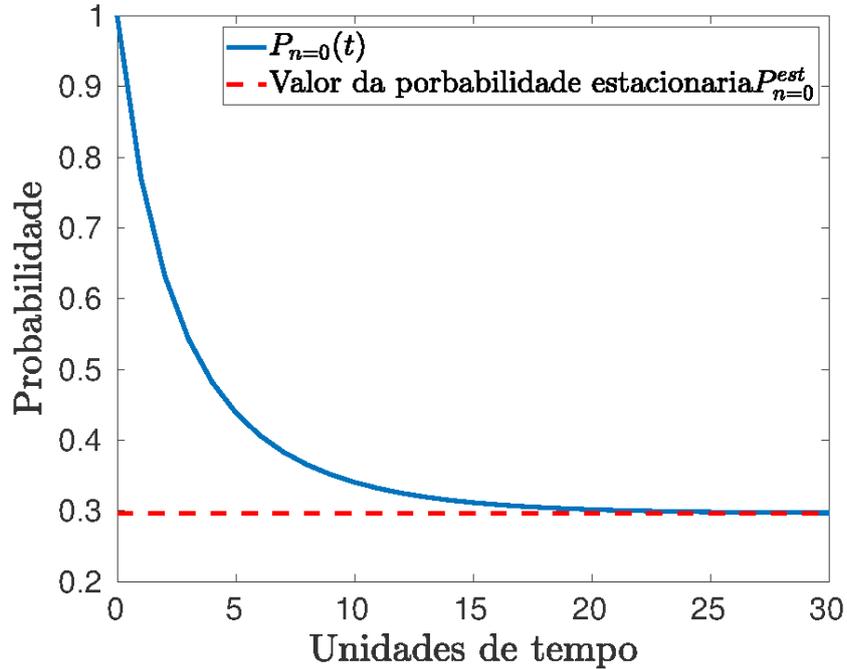
$$P_n(t \rightarrow 0) = P_n^{est} (1 - (\varepsilon \rightarrow 1))^n (1 - (\varepsilon \rightarrow 1)\Lambda)^{-\nu-n}. \quad (3.70)$$

**Figura 9** – Comparação entre as soluções obtidas do processo BN no equilíbrio e a distribuição dinâmica BN para valores diferentes de  $n$  e  $t \gg 1$  ( $\alpha = 0.3$ ,  $\beta = 0.1$  e  $\nu = 3$ ).



Fonte: O autor(2020)

**Figura 10** – Comparação entre o processo BN e o valor da distribuição estacionária em  $n = 0$ .



Fonte: O autor(2020)

Note que para qualquer valor de  $n \neq 0$  o valor de  $P_n(0)$  decresce exponencialmente em direção a 0, mas em  $n = 0$

$$P_0(t \rightarrow 0) = P_{n=0}^{est} (1 - (\varepsilon \rightarrow 1)\Lambda)^{-\nu} \tag{3.71}$$

e portanto

$$P_0(t \rightarrow 0) = \frac{(\nu - 1)!}{(\nu - 1)!} (1 - \Lambda)^\nu (1 - (\varepsilon \rightarrow 1)\Lambda)^{-\nu} \quad (3.72)$$

$$P_0(t \rightarrow 0) = 1, \quad (3.73)$$

como esperado.

### 3.2.2 Representação matricial do processo BN

Tendo em vista possíveis generalizações para os processos de ordem superior na hierarquia da teoria H, vamos obter a representação matricial do hamiltoniano no formalismo de Baez. Para isso é preciso primeiro achar a equação mestra. Usando a equação (3.28) e substituindo  $F(z, t)$  pela sua definição em termos da probabilidade  $P_n(t)$ , obtemos

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^N z^k \frac{dP_k(t)}{dt} &= \beta\nu \sum_{k=0}^N (n^+ - 1) P_k(t) z^k + \beta \sum_{k=0}^N (n^+ n^+ n^- - n^+ n^-) P_k(t) z^k \\ &\quad + \alpha \sum_{k=0}^N (n^- - n^+ n^-) P_k(t) z^k \end{aligned} \quad (3.74)$$

$$\Rightarrow \sum_{k=0}^N z^k \frac{dP_k(t)}{dt} = \beta\nu \sum_{k=0}^N (n^+ - 1) P_k(t) z^k + \beta \sum_{k=0}^N k(n^+ - 1) P_k(t) z^k + \alpha \sum_{k=0}^N (n^- - n^+ n^-) P_k(t) z^k \quad (3.75)$$

$$\Rightarrow \sum_{k=0}^N z^k \frac{dP_k(t)}{dt} = \beta\nu \sum_{k=0}^N P_k(t) (z^{k+1} - z^k) + \beta \sum_{k=1}^N k P_k(t) (z^{k+1} - z^k) + \alpha \sum_{k=1}^N k P_k(t) (z^{k-1} - z^k) \quad (3.76)$$

Ao substituir (3.3) em (3.28) usamos a versão menos fatorada dos diagramas de Baez, uma vez que estamos trabalhando dentro de somas sobre  $n$ . Outra forma de ver isso é fazendo  $n = n^+ n^-$  de onde o hamiltoniano da segunda transição fica  $\beta(n^+ - 1)nF(z, t) \Rightarrow \beta(n^+ - 1)n^+ n^- F(z, t) \Rightarrow \beta(n^+ n^+ n^- - n^+ n^-)F(z, t)$ . Note que podemos introduzir e tirar estes operadores dentro da soma sem afetar o resultado, já que não operam diretamente sobre a variável muda, mas após atuar sobre a função obtemos funções que não podemos retirar da soma. Observe também que nas segunda e terceira somas do membro direito da equação (3.76)  $k$  começam no valor um, porém isso não impedirá adicioná-la com as outras somas, visto que o primeiro termo ( $k = 0$ ) é nulo. Podemos, portanto, considerar que todas as somas começam em  $k = 0$ .

Com ajuda dos operadores (3.11) e (3.12), podemos rescrever os termos com  $z$  nas somas acima como

$$(z^{k+1} - z^k) = (\mathbb{P}^+ - 1)z^k \quad (3.77)$$

$$(z^{k-1} - z^k) = (\mathbb{P}^- - 1)z^k \quad (3.78)$$

Substituindo (3.77) e (3.78) na soma (3.76), obtemos

$$\sum_{k=0}^N z^k \frac{dP_k(t)}{dt} = \beta\nu \sum_{k=0}^N P_k(t)(\mathbb{P}^+ - 1)z^k + \beta \sum_{k=1}^N kP_k(t)(\mathbb{P}^+ - 1)z^k + \alpha \sum_{k=1}^N kP_k(t)(\mathbb{P}^- - 1)z^k \quad (3.79)$$

Aplicando a propriedade (3.13) em (3.79) obtemos

$$\sum_{k=0}^N z^k \frac{dP_k(t)}{dt} = \beta\nu \sum_{k=1}^{N+1} z^k (\mathbb{P}^- - 1)P_k(t) + \beta \sum_{k=1}^{N+1} z^k (\mathbb{P}^- - 1)kP_k(t) + \alpha \sum_{k=0}^{N-1} z^k (\mathbb{P}^+ - 1)kP_k(t) \quad (3.80)$$

$$\Rightarrow z^k \frac{dP_k(t)}{dt} = \beta\nu z^k (\mathbb{P}^- - 1)P_k(t) + \beta z^k (\mathbb{P}^- - 1)kP_k(t) + \alpha z^k (\mathbb{P}^+ - 1)kP_k(t) \quad (3.81)$$

$$\Rightarrow \frac{dP_k(t)}{dt} = \beta\nu (\mathbb{P}^- - 1)P_k(t) + \beta (\mathbb{P}^- - 1)kP_k(t) + \alpha (\mathbb{P}^+ - 1)kP_k(t), \quad (3.82)$$

a qual pode ser escrita compactamente como

$$\frac{dP_n(t)}{dt} = \beta(\mathbb{P}^- - 1)(\nu + n)P_n(t) + \alpha(\mathbb{P}^+ - 1)nP_n(t) \quad (3.83)$$

Aplicando as definições dos operadores (3.77) e (3.78), obtemos uma equação mestra em sua forma padrão

$$\frac{dP_n(t)}{dt} = \beta\mathbb{P}^-(\nu + n)P_n(t) - \beta(\nu + n)P_n(t) + \alpha\mathbb{P}^+nP_n(t) - \alpha nP_n(t) \quad (3.84)$$

$$\frac{dP_n(t)}{dt} = \beta(\nu + n - 1)P_{n-1}(t) - \beta(\nu + n)P_n(t) + \alpha(n + 1)P_{n+1}(t) - \alpha nP_n(t) \quad (3.85)$$

$$\frac{dP_n(t)}{dt} = \alpha(n + 1)P_{n+1}(t) + \beta(\nu + n - 1)P_{n-1}(t) - (\beta(\nu + n) + \alpha n)P_n(t) \quad (3.86)$$

De forma explícita, o sistema de equações diferenciais fica

$$\begin{aligned}
\dot{P}_0(t) &= -\beta\nu P_0(t) + \alpha P_1(t) \\
\dot{P}_1(t) &= \beta\nu P_0(t) - (\beta(\nu + 1) + \alpha)P_1(t) + 2\alpha P_2(t) \\
\dot{P}_2(t) &= \beta(\nu + 1)P_1(t) - (\beta(\nu + 2) + 2\alpha)P_2(t) + 3\alpha P_{n+1}(t) \\
\dot{P}_3(t) &= \beta(\nu + 2)P_2(t) - (\beta(\nu + 3) + 3\alpha)P_3(t) + 4\alpha P_{n+1}(t) \\
&\vdots \\
\dot{P}_n(t) &= \beta(\nu + n - 1)P_{n-1}(t) - (\beta(\nu + n) + \alpha n)P_n(t) + \alpha(n + 1)P_{n+1}(t)
\end{aligned} \tag{3.87}$$

A representação matricial pode ser escrita resumidamente como

$$\begin{bmatrix} \dot{P}_0(t) \\ \dot{P}_1(t) \\ \dot{P}_2(t) \\ \dot{P}_3(t) \\ \dot{P}_4(t) \\ \dot{P}_5(t) \\ \dot{P}_6(t) \\ \dot{P}_7(t) \\ \vdots \end{bmatrix}_{n \times 1} = \mathbb{H}_{BN(n \times n)} \begin{bmatrix} P_0(t) \\ P_1(t) \\ P_2(t) \\ P_3(t) \\ P_4(t) \\ P_5(t) \\ P_6(t) \\ P_7(t) \\ \vdots \end{bmatrix}_{n \times 1} \tag{3.88}$$

Usando a representação matricial dos operadores  $\mathbb{P}^-$  e  $\mathbb{P}^+$ , veja (3.24), em (3.83) obtemos

$$\mathbb{H}_{BN}^- = \beta \left( \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \end{bmatrix}_n - \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \end{bmatrix}_n \right) \begin{bmatrix} \nu & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \nu + 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \nu + 2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \nu + 3 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \end{bmatrix}_n \tag{3.89}$$

$$\mathbb{H}_{BN}^+ = \alpha \left( \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \end{bmatrix}_n - \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \end{bmatrix}_n \right) \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \end{bmatrix}_n \tag{3.90}$$

Portanto

$$\mathbb{H}_{BN} = \mathbb{H}_{BN}^- + \mathbb{H}_{BN}^+ \tag{3.91}$$

$$\dot{\vec{P}}(t) = \mathbb{H}_{BN} \vec{P}(t), \tag{3.92}$$

onde

$$\mathbb{H}_{BN} = \begin{bmatrix} -\beta\nu & \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \beta\nu & -\beta(\nu+1) - \alpha & 2\alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \beta(\nu+1) & -\beta(\nu+2) - 2\alpha & 3\alpha & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \beta(\nu+2) & -\beta(\nu+3) - 3\alpha & 4\alpha & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}_n \quad (3.93)$$

A forma explícita da equação matricial fica

$$\begin{bmatrix} \dot{P}_0(t) \\ \dot{P}_1(t) \\ \dot{P}_2(t) \\ \dot{P}_3(t) \\ \dot{P}_4(t) \\ \dot{P}_5(t) \\ \dot{P}_6(t) \\ \dot{P}_7(t) \\ \vdots \end{bmatrix}_{n \times 1} = \begin{bmatrix} -\beta\nu & \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \beta\nu & -\beta(\nu+1) - \alpha & 2\alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \beta(\nu+1) & -\beta(\nu+2) - 2\alpha & 3\alpha & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \beta(\nu+2) & -\beta(\nu+3) - 3\alpha & 4\alpha & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}_{n \times n} \begin{bmatrix} P_0(t) \\ P_1(t) \\ P_2(t) \\ P_3(t) \\ P_4(t) \\ P_5(t) \\ P_6(t) \\ P_7(t) \\ \vdots \end{bmatrix}_{n \times 1} \quad (3.94)$$

A estrutura da matriz hamiltoniana será muito útil na generalização do processo BN para processos mais altos na hierarquia da teoria H.

### 3.3 ANÁLISE TERMODINÂMICA

Como foi apresentado na seção 2.2, com a solução analítica de um processo estocástico discreto podemos obter não apenas a entropia do sistema em cada instante de tempo, mas também a *taxa variação de entropia*,  $\dot{S}$ , que inclui a *taxa produção de entropia*,  $\Pi(t)$ , e o *fluxo de entropia*,  $\Phi(t)$ , que são definidos a partir da probabilidade dependente do tempo. Existe enorme interesse tanto teórico, quanto experimental, em caracterizar processos de relaxamento através dessas grandezas termodinâmicas. Nesta seção, vamos usar nossa solução analítica para calcular explicitamente  $\Pi(t)$  e  $\Phi(t)$ .

Primeiramente, vamos introduzir a notação,  $H_{jk}$ , para as entradas de  $\mathbb{H}$ , de modo que a equação mestra fica:

$$\dot{P}_j(t) = \sum_k H_{jk} P_k(t). \quad (3.95)$$

Note que por conta da forma de  $\mathbb{H}$  do processo de Poisson vemos que todos os termos de (2.94) são nulos, ou seja  $\Phi(t) = 0$ . Esse é um resultado esperado dado que este tipo de processo é unidirecional, no sentido que um aumento do tempo implica necessariamente um aumento de sucessos acontecidos, de modo que o sistema nunca atinge um estado estacionário. Pode-se

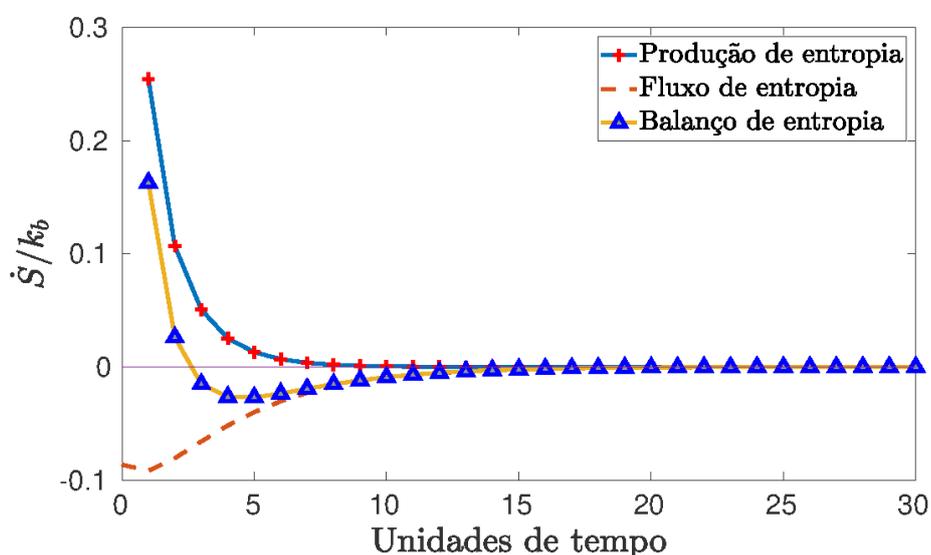
entender então que qualquer que seja o evento de sucesso  $A$ , e chamemos agora de sucesso apenas por ter maior probabilidade de acontecer que  $\bar{A}$ , devemos têr

- Um processo que tende a aumentar  $A$  no tempo está aumentando a entropia do sistema.
- Se o número de sucessos  $A$  permanece constante, a entropia é constante.
- Se o número de fracassos  $\bar{A}$  aumenta, então podemos interpretar o evento como uma redução de entropia, neste instante de tempo.

Concluimos que em um processo de Poisson, a taxa de variação de entropia coincide com a taxa de produção de entropia.

O processo BN, porém, tem duas taxas em sentidos opostos. Isto quer dizer que podemos achar as duas taxas de entropia, conforme mostrado no gráfico da figura 11, onde também pode-se observar que a produção de entropia é sempre positiva, esta refere-se á entropia de Shannon do sistema.

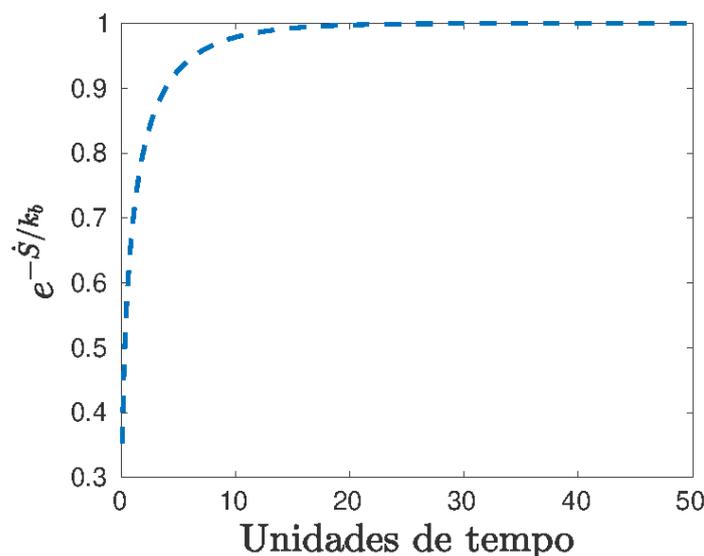
**Figura 11** – Gráfico das taxas de variação de entropia em um processo BN com parâmetros  $\alpha = 0.3$ ,  $\beta = 0.1$  e  $\nu = 3$ . Como prediz a termodinâmica estocástica, temos dois comportamentos dos termos da taxa de variação da entropia total, um sempre maior que zero ( $\Pi(t)$ ) e outro que poderia ter qualquer sinal ( $\Phi(t)$ ), mas que é sempre menor que zero no processo BN.



Fonte: O autor(2020)

Pela termodinâmica estocástica, a taxa de produção de entropia como função do tempo deve satisfazer também uma condição de balanço detalhado, que é um tipo de teorema de flutuação-dissipação (HARRIS; SCHÜTZ, 2007)(ESPOSITO; SCHALLER, 2012). Uma forma gráfica de visualizar a validade deste teorema é analisar a convergência de  $\exp[-\dot{S}/k_b]$ . Na figura

**Figura 12** – Se pode apreciar neste gráfico como a entropia achada cumpre com o teorema de flutuação-dissipação.



Fonte: O autor(2020)

12, podemos ver que este valor converge exponencialmente para o seu valor médio, exatamente 1, que coincide com os dados apresentados na literatura sobre a processos de salto.

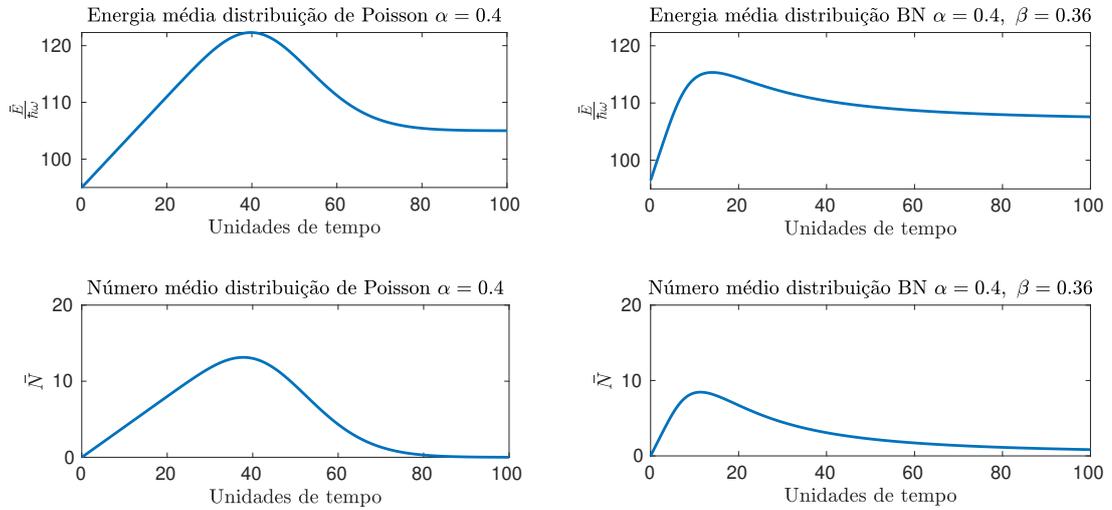
Para comparar os dois processos estocásticos, Poisson e BN, vamos supor um exemplo puramente hipotético, um sistema no qual uma série de osciladores harmônicos estão acoplados a um reservatório de forma tal que a quantidade de osciladores no primeiro estado excitado corresponde a uma distribuição de Poisson no primeiro caso e uma distribuição BN no segundo caso com uma quantidade constante  $\nu = 3$  no estado base. Calculando a energia média e o número médio de estados excitados em função do tempo, obtemos os gráficos apresentados na figura 13. Note a diferença qualitativa no comportamento das médias, indicando a relevância do mecanismo de relaxação.

As formas analíticas explícitas de  $\Pi(t)$  e  $\Phi(t)$  são muito complexas para serem apresentadas aqui. No entanto, fica claro que temos em princípio uma previsão concreta para o comportamento da taxa de produção de entropia da teoria H, no caso de um único nível na hierarquia ( $N = 1$ ). Na próxima seção, vamos considerar o caso de  $N > 1$  usando uma aproximação do tipo Born-Oppenheimer.

### 3.3.1 Aproximação de Born-Oppenheimer

Considere um reservatório de  $N$  partículas acoplado a um sistema de forma tal que o efeito do sistema sobre o reservatório é desprezível. A equação mestra que descreve este reservatório é

**Figura 13** – Os gráficos mostram a energia e número médio de osciladores no primeiro estado excitado respondendo ao processo de Poisson (primeira coluna) e ao processo BN (segunda coluna).



Fonte: O autor(2020)

$$\dot{P}_n(t) = a(n+1)P_{n+1}(t) - anP_n(t) \quad P_n(0) = \delta_{nN} \quad (3.96)$$

Vamos tentar uma solução do tipo:

$$P_n(t) = C_n^N [\Lambda(t)]^n [1 - \Lambda(t)]^{N-n} \quad (3.97)$$

Para obter a função  $\Lambda(t)$ , executemos primeiro a derivada

$$\dot{P}_n(t) = C_n^N \frac{\partial}{\partial t} \left[ [\Lambda(t)]^n [1 - \Lambda(t)]^{N-n} \right] \quad (3.98)$$

$$= \left( n[\Lambda(t)]^{n-1} [1 - \Lambda(t)]^{N-n} \right) \frac{\partial \Lambda(t)}{\partial t} - \left( [(N-n)\Lambda(t)]^n [1 - \Lambda(t)]^{N-n-1} \right) \frac{\partial \Lambda(t)}{\partial t} \quad (3.99)$$

$$\Rightarrow = \left( \frac{n}{\Lambda(t)} - \frac{N-n}{1 - \Lambda(t)} \right) P_n(t) \frac{\partial \Lambda(t)}{\partial t} \quad (3.100)$$

O segundo lado da equação mestra fica

$$a(n+1)P_{n+1}(t) - anP_n(t) = a \left( (N-n) \frac{\Lambda(t)}{1 - \Lambda(t)} - n \right) P_n(t) \quad (3.101)$$

Comparando os dois lados, temos

$$\left( \frac{n}{\Lambda(t)} - \frac{N-n}{1 - \Lambda(t)} \right) \frac{\partial \Lambda(t)}{\partial t} = a \left( (N-n) \frac{\Lambda(t)}{1 - \Lambda(t)} - n \right) \quad (3.102)$$

Multiplicando esta equação por  $\Lambda(t)(1 - \Lambda(t))$ , temos

$$\left( n(1 - \Lambda(t)) - (N - n)\Lambda(t) \right) \frac{\partial \Lambda(t)}{\partial t} = a \left( (N - n)[\Lambda(t)]^2 - n(1 - \Lambda(t))\Lambda(t) \right) \quad (3.103)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \Lambda(t)}{\partial t} = -a\Lambda(t) \quad (3.104)$$

$$\Rightarrow \Lambda(t) = e^{-\gamma t} \quad (3.105)$$

Como o sistema vai ganhar partículas sempre que o reservatório perder partículas, podemos dizer que a probabilidade de uma partícula chegar ao sistema é  $1 - e^{-\gamma t}$ . Se agora fizermos uma composição da distribuição função gama com esta probabilidade, obtemos

$$\gamma(\theta) = \frac{\theta^{\nu-1}}{(\tau(1 - \epsilon'))^\nu \Gamma(\nu)} e^{-\frac{\theta}{\tau(1 - \epsilon')}} \quad (3.106)$$

onde  $\epsilon' = e^{-\gamma t}$ . Note agora que, compondo esta distribuição gama modificada com a função geradora do processo Poisson, temos

$$G(z, t) = \int_0^\infty \gamma(\theta) e^{\theta(z-1)} d\theta \quad (3.107)$$

$$G(z, t) = \frac{1}{(\tau(1 - \epsilon'))^\nu \Gamma(\nu)} \int_0^\infty \theta^{\nu-1} e^{-\frac{\theta}{\tau(1 - \epsilon')}} e^{-\theta t(z-1)} d\theta \quad (3.108)$$

$$G(z, t) = \frac{1}{(\tau(1 - \epsilon'))^\nu \Gamma(\nu)} \int_0^\infty \theta^{\nu-1} e^{-\theta((\tau(1 - \epsilon'))^{-1} + (z-1))} d\theta \quad (3.109)$$

$$(3.110)$$

Fazendo a mudança de variáveis:

$$\theta = u(\tau(1 - \epsilon')) \Rightarrow d\theta = (\tau(1 - \epsilon')) du \quad (3.111)$$

obtemos

$$G(z, t) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty u^{\nu-1} e^{-u(1 + (\tau(1 - \epsilon'))(z-1))} du \quad (3.112)$$

Fazendo a substituição:

$$x = u(1 + (\tau(1 - \epsilon'))(z - 1)) \Rightarrow dx = (1 + (\tau(1 - \epsilon'))(z - 1)) du \quad (3.113)$$

obtemos

$$G(z, t) = \frac{(1 + (\tau(1 - \epsilon'))(z - 1))^{-\nu}}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty x^{\nu-1} e^{-x} dx \quad (3.114)$$

$$\Rightarrow G(z, t) = (1 + \tau(1 - \epsilon')(z - 1))^{-\nu} \quad (3.115)$$

Finalmente, tomando o limite  $\tau \rightarrow -a$  obtemos

$$G(z, t) = (1 - \alpha(1 - \epsilon')(z - 1))^{-\nu}. \quad (3.116)$$

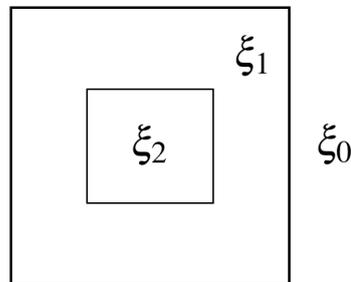
Aplicando agora a propriedade (2.69) obtemos:

$$P_n(t) = C_n^{m+\nu-1} \left[ \frac{\Lambda(1 - \epsilon')}{1 - \Lambda\epsilon'} \right]^n \left[ \frac{(1 - \Lambda)}{1 - \Lambda\epsilon'} \right]^\nu. \quad (3.117)$$

Como em geral  $\gamma \neq \beta - \alpha$ , esta equação é uma boa aproximação da solução exata do processo BN achada anteriormente. Note, porém, que no equilíbrio esta solução converge para a distribuição estacionária exata do processo BN.

A justificativa para a substituição do termo  $\tau(1 - \epsilon')$  pode ser feita da seguinte forma. Considere no exemplo anterior a estrutura do modelo hierárquico, representado na figura 14, dado pela equação de taxa (1.1). Como o sistema dividido desta forma tem apenas dois equilíbrios locais,

**Figura 14** – Modelo hierárquico de um sistema com dois subsistemas. A versão discreta da teoria H leva a uma distribuição BN no equilíbrio. Note que enquanto um sistema faz o papel de reservatório com um fluxo de probabilidade negativo, o subsistema interior percebe fluxo nos dois sentidos.



Fonte: O autor(2020)

se desprezarmos a ação do sistema mais interior sobre  $\xi_1$  teríamos apenas a parte determinista da equação (1.1). Portanto,

$$\dot{\xi}_1 = \alpha_1(\xi_0 - \xi_1) \quad (3.118)$$

Esta equação é de fácil resolução. Obtemos

$$\xi_1 = \xi_0(1 - e^{-\alpha_1 t}) \quad (3.119)$$

Analisando agora o segundo sistema com  $\xi_1$  como reservatório temos:

$$d\xi_2 = \alpha_2(\xi_1 - \xi_2)dt + k_2\xi_2^{1/2}\xi_1^{-1/2}dW_2(t), \quad (3.120)$$

que tem como solução estacionária a distribuição gama

$$p(\xi_2|\xi_1) = \frac{(\xi_2/\xi_1)^{\beta_2}}{\Gamma(\beta_2)} \xi_2^{\beta_2-1} e^{-\beta_2 \xi_2/\xi_1} \equiv \gamma(\xi_2) \quad (3.121)$$

onde

$$\frac{\xi_1}{\beta_2} = \frac{\xi_0}{\beta_2} (1 - e^{-\alpha_1 t}) \quad (3.122)$$

Suponha agora que este sistema hierárquico controla a evolução dinâmica dos parâmetros do processo discreto correspondente, de modo que se admitirmos que localmente na menor escala temos um processo Poisson, sua média  $\xi_2$  seria, no espírito da teoria H, distribuída conforme a densidade  $\gamma(\epsilon_2)$ . Portanto

$$G(z, t) = \int_0^\infty \gamma(\xi_2) e^{\xi_2(z-1)} d\xi_2 \quad (3.123)$$

$$\Rightarrow G(z, t) = \left(1 + \frac{\xi_0}{\beta_2} (1 - e^{-\alpha_1 t})(z - 1)\right)^{-\beta_2} \quad (3.124)$$

Definindo

$$\Lambda = \frac{\xi_0/\beta_2}{\xi_0/\beta_2 - 1} \quad (3.125)$$

obtemos a função (3.117) com

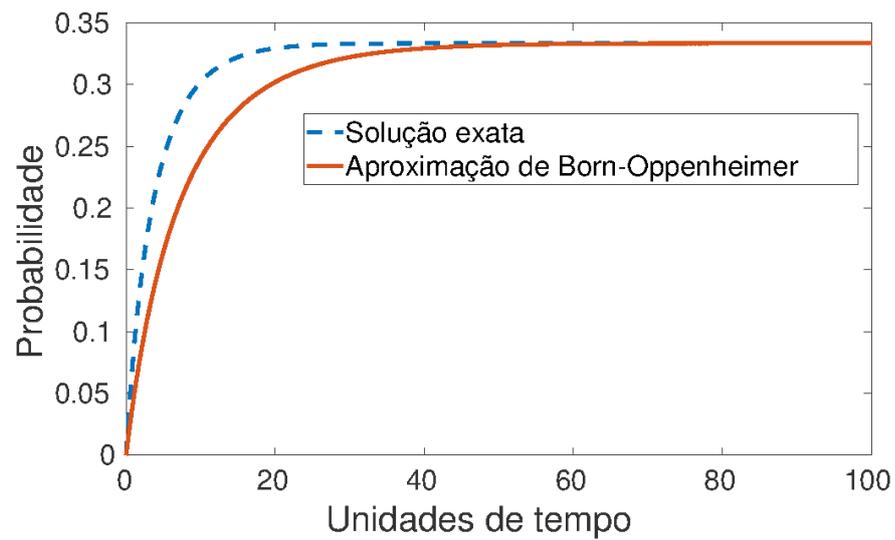
$$\beta_2 = \nu \quad (3.126)$$

$$\epsilon' = e^{-\alpha_1 t} \quad (3.127)$$

Nesta representação fica mais evidente a diferença entre o processo BN achado pela equação mestra e com a aproximação. A diferença está no expoente do fator temporal dado que  $\alpha_1$  representa apenas a taxa com que são tiradas partículas do reservatório. As evoluções temporais das soluções exata e aproximada no processo BN estão mostradas na figura 15. Note que a aproximação é muito boa e torna-se exata para  $t \rightarrow \infty$ , conforme esperado.

Este procedimento aproximado, que denominamos do tipo Born-Oppenheimer por desprezar as flutuações na variável  $\xi_1$  do reservatório mais interno, poderia em princípio ser estendido para um número arbitrário de níveis na hierarquia. Desta forma, teríamos expressões analíticas aproximadas para a taxa de produção de entropia da teoria H para  $N$  arbitrário. Este cálculo, porém, está fora do escopo desta dissertação e ficará como perspectiva para um futuro trabalho.

**Figura 15** – Comparação das soluções exata (em azul, linhas descontínuas) e a aproximação (em vermelho, linha contínua) em função do tempo. Parâmetros:  $\alpha = 0.3$ ,  $\beta = 0.1$ .



Fonte: O autor(2020)

## 4 CONCLUSÕES

A teoria H prediz que sistemas hierárquicos fora do equilíbrio podem ser estudados através da solução estacionária de uma hierarquia de processos estocásticos acoplados. Existem variáveis aleatórias, denominadas variáveis de base, que caracterizam o equilíbrio local em cada nível da hierarquia e uma variável fixa que caracteriza o equilíbrio global do sistema. Estas variáveis de base satisfazem uma distribuição de probabilidade condicional estacionária do tipo gamma ou gamma inversa. Quando se consideram sistemas de muitos graus de liberdade é possível aplicar o teorema central do limite nas variáveis que caracterizam os equilíbrios locais. Neste ponto, surge a possibilidade de uma versão discreta da teoria, descrita brevemente na seção 2.3. Na versão discreta, existem processos estocásticos discretos diferentes dependendo do número de níveis na hierarquia, sendo Poisson para zero níveis ( $N = 0$ ), binomial negativo para um nível ( $N = 1$ ) e assim por diante. Uma vantagem da teoria H discreta é que ela apresenta uma equação mestra para a dinâmica fora do equilíbrio, o que torna possível uma conexão direta com a abordagem de termodinâmica estocástica, incluindo versões das leis da termodinâmica para sistemas fora do equilíbrio.

Nesta dissertação, estudamos detalhadamente a evolução temporal dos dois primeiros processos da hierarquia da teoria H discreta, correspondentes aos processos de Poisson e binomial negativo. Para isto, utilizamos o método de Baez, que consiste em descrever o problema através das interações que geram ou destroem as espécies que se querem distribuir. Em analogia com a dinâmica de uma sistema quântico efetivo, são definidos operadores de levantamento e abaixamento de populações para representar os hamiltonianos que descrevem as interações. O procedimento é guiado por diagramas, que com regras simples levam a equações de taxas para as funções geradoras dos correspondentes processos estocásticos. Uma limitação do método de Baez é que os diagramas devem representar em cada instante de tempo a quantidade de espécies que vão se distribuir, ou seja não é um diagrama explícito da distribuição. No entanto, ele serve como um interessante modelo para a representação dos processos estocásticos nos níveis mais altos da hierarquia da teoria H. No caso do processo de Poisson, obtemos diretamente a forma clássica reportada na literatura. No caso do processo binomial negativo, propomos um diagrama para representar a quantidade de espécies em uma distribuição do mesmo tipo. Com isto obtivemos, a função geradora do processo e distribuição de probabilidade.

Na segunda parte dos resultados principais, obtivemos a equação mestra do processo binomial negativo partindo da equação da função geradora obtida anteriormente. Este método possibilita representar a matriz de interações da equação mestra. Baseados então na definição termodinâmica de entropia de um sistema com distribuição de probabilidade conhecida para todos os tempos, calculamos as entropias dos processos, assim como as taxas de produção de entropia.

Na parte final deste trabalho consideramos a possibilidade de estender o cálculo da taxa de produção de entropia para níveis mais altos na hierarquia da teoria H usando uma aproximação de tipo Born-Oppenheimer. Para isto, consideramos dois subsistemas com o sistema exterior agindo como um reservatório absoluto, isto é ignorando suas flutuações. Com esta consideração, achamos uma função para a variável que caracteriza o equilíbrio local do sistema em função do tempo, e aplicando a equação de recorrência da teoria H, obtivemos o processo binomial negativo para caracterizar o sistema interior. Este resultado é uma aproximação do processo obtido com a equação mestra no começo do capítulo como se mostrou na figura 15, porém é exata no equilíbrio.

Como perspectiva para os próximos trabalhos, gostaríamos de estender esta aproximação para os demais processos na hierarquia da teoria H e tentar achar uma formula recorrente aproximada. Baseados nos resultados, uma boa suposição seria esperar distribuições de probabilidade na forma:

$$P_n(t) = \frac{1}{n! \Gamma(\vec{\nu})} G_{N,1}^{1,N} \left( \vec{1} - \vec{\nu} \middle| a(1 - e^{-at}) \right) \quad N > 0$$

$$a = \frac{\Lambda}{1 - \Lambda}.$$

Os cálculos de expressões analíticas para as taxas de produção de entropia  $\Pi(t)$  em função de  $N$  seria um resultado muito interessante. Tendo em vista o substancial sucesso da teoria H em descrever sistemas complexos hierárquicos, como fluidos em turbulência e emissão estimulada de lasers aleatórios, o estudo dos processos de relaxação nesses sistemas parece ser a próxima etapa no refinamento da descrição estatística.

## REFERÊNCIAS

- BAEZ, J. C.; BIAMONTE, J. **Quantum Techniques in Stochastic Mechanics**. [S.l.]: World Scientific Publishing Co Pte Ltd, 2018. ISBN 978-981-322-693-7.
- BAILLY, F.; LONGO, G. Biological organization and negative entropy: Based on schroedinger's reflections. 2008. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/0801.2038>>. Acesso em 10 mai. 2019.
- BASHARIN, G. P.; LANGVILLE, A. N.; NAUMOV, V. A. The Life and Work of A . A . Markov. **Linear Algebra and its Applications**, v. 386, p. 3–26, 2004.
- BECK, C.; COHEN, E. G. D.; SWINNEY, H. L. From time series to superstatistics. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 72, p. 056133, Nov 2005.
- BOHÓRQUEZ, M.; HERNANDO, O. **Quantum transport : Coherent transport in complex systems and quantum feedback in qubit systems**. Tese (Doutorado) — UFPE, 2018.
- BOKSENBOJM, E.; WYNANTS, B. Entropy and efficiency of a molecular motor model. **J. Phys. A: Math. Theor.**, v. 42, n. 445003, 2009.
- BONDAREV, B. V. Quantum markovian kinetic equation for harmonic oscillator. 2013. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/1302.0303>>. Acesso em: 10de mai. 2019.
- BONDAREV, B. V. Lindblad Equation for Harmonic Oscillator : Uncertainty Relation Depending on Temperature. **Applied Mathematics**, v. 8, n. 11, p. 1529–1538, 2017.
- BORKAR, V. S.; KONDA, V. R.; MITTER, S. K. On De Finetti coherence and Kolmogorov probability. **Statistic and Probability Letters**, v. 66, p. 417–421, 2004.
- COSTA, F. S. **Sobre as funções G de Meijer e H de Fox**. Águas de Lindóia/SP: SBMAC, 2012. 698–704 p. ISBN 978-85-8215-039-9.
- ENGLERT, B.-g. Quantum optical master equations: The use of damping bases Hans-Jurgen. **Phys. Rev. A**, v. 47, n. 4, p. 3311–3329, 1993.
- ENGLERT, B.-g.; MORIGI, G. Five Lectures On Dissipative Master Equations. **Lecture Notes in Physics**, Springer Series in Synergetics, v. 611, p. 55–106, 2002.
- ESPOSITO, M.; SCHALLER, G. Stochastic thermodynamics for Maxwell demon feedbacks. **Epl**, v. 99, n. 3, 2012. ISSN 02955075. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/1204.5671>>. Acesso em: 10 de mai. 2019.
- FARLOW, S. J. **Partial Differential Equations for Scientists and Engineers**. [S.l.]: Mathematics, 1993. ISBN 04-86676-20.
- GARDINER, C. W. **Handbook of Stochastic Methods: For Physics, Chemistry and the Natural Sciences**. Third edit. [S.l.]: Springer Series in Synergetics, 2004. ISBN 3-540-20882-8.
- GONZALEZ, I. R. R. *et al.* Turbulence hierarchy in a random fibre laser. **Nature Communications**, n. May, p. 8–15, 2017.

HARRIS, R. J.; SCHÜTZ, G. M. Fluctuation theorems for stochastic dynamics. **Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment**, IOP Publishing, v. 2007, n. 07, p. P07020–P07020, Jul 2007. ISSN 1742-5468.

JAYNES, E. T. **Probability Theory The Logic of Science**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2003. ISBN 978-0-511-06589-7.

KOLMOGOROV, A. N. **Foundations of the theory of probability**. [S.l.]: Chelsea Publishing Company, 1950.

KOZUBOWSKI, T.; PODGORSKI, K. Distributional properties of the negative binomial lévy process. Center for Probability and Mathematical Statistics, Wrocław, v. 29, n. Fasc. 1, p. 43–71, 2009. ISSN 0208-4147. Disponível em: <<http://www.math.uni.wroc.pl/~pms/files/29.1/Article/29.1.3.pdf>>. Acesso em: 10 de mai. 2019.

MACÊDO, A. M. S. *et al.* Universality Classes of Fluctuation Dynamics in Hierarchical Complex Systems. **Phys. Rev. E**, v. 95, n. 032315, p. 1–6, 2017.

MENDELSON, E. **Theory and Problems of Boolean Algebra & Switching Circuits**. [S.l.]: McGraw-Hill Book Company, 1970. ISBN 07-041460-2.

PITMAN, J.; YOR, M. A guide to Brownian motion and related stochastic processes. v. 0, n. 0000, 2018. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/1802.09679>>. Acesso em: 10 de mai. 2019.

SALAZAR, D. S. P.; VASCONCELOS, G. L. Stochastic Dynamical Model of Intermittency in Fully Developed Turbulence. **Phys. Rev. E**, v. 82, n. 047301, p. 1–10, 2010.

SALAZAR, D. S. P.; VASCONCELOS, G. L. Stochastic dynamical model of intermittency in fully developed turbulence. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 82, p. 047301, Oct 2010.

SALAZAR, D. S. P.; VASCONCELOS, G. L. Multicanonical distribution: Statistical equilibrium of multiscale systems. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 86, p. 050103, Nov 2012.

SALINAS, S. **Introdução à Física Estatística**. Segunda edição. [S.l.]: Editora da Universidade de São Paulo, 2005. ISBN 978-85-314-0386-6.

SCHNAKENBERG, J. Network theory of microscopic and macroscopic behavior of master equation systems. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 48, p. 571–585, Oct 1976.

SPIEGEL, M. R. **Fourier Analysis with Applications to Boundary Value Problems**. [S.l.]: Schaum's Outline, 1974. ISBN 00-70602-190.

TOMÉ, T. Entropy production in nonequilibrium systems described by a Fokker-Planck equation. **Brazilian Journal of Physics**, v. 36, n. 4, p. 1–9, 2006.

TOUCHETTE, H.; BECK, C. Asymptotics of superstatistics. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 71, p. 016131, Jan 2005.

TSALLIS, C.; SOUZA, A. M. C. Constructing a statistical mechanics for beck-cohen superstatistics. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 67, p. 026106, Feb 2003.

Vam Kampen, N. G. **Stochastic Processes in Physics and Chemistry**. Third edit. [S.l.]: Elsevier, 2007. ISBN 978-0-444-52965-7.

VASCONCELOS, G. L.; SALAZAR, D. S. P.; MACÊDO, A. M. S. A maximum entropy approach to H-theory: Statistical mechanics of hierarchical systems. **Phys. Rev. E Letter**, American Physical Society, v. 032315, n. 2017, p. 1–20, 2017. ISSN 2470-0045.

YOUSCHKEVITCH, A. A. N. Kolmogorov: Historian and philosopher of mathematics on the occasion of his 80th birthday. **Historia Mathematica**, v. 10, n. 4, p. 383–395, 1983. ISSN 03150860.

ZIENER, R.; MARITAN, A.; HINRICHSEN, H. On entropy production in nonequilibrium systems. **Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment**, IOP Publishing, v. 2015, n. 8, p. P08014, aug 2015.

## APÊNDICE A – LIMITE DAS SOMAS

Considere a soma

$$\sum_{k=0}^N z^k \dot{P}_k = \alpha \sum_{k=0}^N (z^{k+1} - z^k) k P_k \quad (\text{A.1})$$

Usando a propriedade (3.11) e a propriedade (3.13) obtemos

$$\sum_{k=0}^N z^k \dot{P}_k = \alpha \sum_{k=1}^{N+1} P_{k-1} z^k - \alpha \sum_{k=0}^N P z^k \quad (\text{A.2})$$

Logo, os elementos da soma são

$$\begin{aligned} \dot{P}_0 &= -\alpha P_0 & k &= 0 \\ z^1 \dot{P}_1 &= \alpha z^1 (P_0 - P_1) & k &= 1 \\ z^2 \dot{P}_2 &= \alpha z^2 (P_1 - P_2) & k &= 2 \\ &\vdots & & \\ z^N \dot{P}_N &= \alpha z^N (P_{N-1} - P_N) & k &= N \\ &\text{Valor não definido para } \dot{P}_{N+1} & k &= N + 1 \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Reconfigurando a soma, podemos dizer que

$$\sum_{k=0}^N z^k \dot{P}_k = \alpha \sum_{k=0}^N z^k (P_{k-1} - P_k) \quad \forall P_i \mid i \in [0, N], i \in \mathbb{N} \quad (\text{A.4})$$

No caso  $\sum_{k=0}^N z^k \dot{P}_k = \alpha \sum_{k=0}^N (z^{k-1} - z^k) k P_k$ , também é válido que

$$\sum_{k=0}^N z^k \dot{P}_k = \alpha \sum_{k=0}^N z^k (P_{k+1} - P_k) \quad \forall P_i \mid i \in [0, N], i \in \mathbb{N} \quad (\text{A.5})$$