

Universidade do Estado do Rio Grande do Norte Faculdade de Ciências Naturais e Exatas Programa de Pós-graduação em Física

Marcone Oliveira da Costa

# Análise Estatística Lei de Potência para Molécula de DNA

Mossoró, novembro de 2016

Marcone Oliveira da Costa

# Análise Estatística Lei de Potência para Molécula de DNA

Dissertação apresentada à Universidade do Estado do Rio Grande do Norte como um dos pré-requisitos para obtenção de título de **MESTRE** em **FÍSICA** 

Orientador: Prof. Dr. Raimundo Silva Junior

Mossoró, novembro de 2016

#### Ficha catalográfica gerada pelo Sistema Integrado de Bibliotecas e Diretoria de Informatização (DINF) - UERN, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

C837a Costa, Marcone Oliveira . Análise Estatística Lei de Potência para Moléculas de DNA / Marcone Oliveira Costa - 2016. 67 p.

> Orientador: Raimundo Silva Junior. Coorientador: Fábio Cabral Carvalho. Dissertação (Mestrado) - Universidade do Estado do Rio Grande do Norte, Programa de Pós-graduação em Física, 2016.

1. Proteínas. 2. Entropia. 3. Tsallis. 4. Kaniadakis. I. Junior, Raimundo Silva, orient. II. Carvalho, Fábio Cabral, co-orient. III. Título.

Marcone Oliveira da Costa

# Análise estatística lei de potência para molécula de DNA

Dissertação apresentada à Universidade do Estado do Rio Grande do Norte como um dos pré-requisitos para obtenção de título de **MESTRE** em **FÍSICA** 

Aprovada em \_\_\_\_ /\_\_\_\_ /\_\_\_\_

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Raimundo Silva Junior Universidade Federal do Rio Grande do Norte

Prof. Dr. Dory Hélio Aires de Lima Anselmo Universidade Federal do Rio Grande do Norte

Prof. Dr. Vamberto Dias de Mello Universidade do Estado do Rio Grande do Norte Para pessoas especiais

Meus Pais Pedro Marlene

Meu Irmão Marlon

# Agradecimentos

À Deus, pela capacitação, força e inspiração para realizar este trabalho. À minha família, em especial os meus pais Pedro Bezerra e Marlene Oliveira, e meu irmão Marlon Manso por sempre me apoiarem nesta empreitada. Agradeço a todos os professores da pósgraduação com os quais pude aprender, em especial ao meu orientador professor Raimundo Silva pela paciência de me orientar.

Agradeço as meus amigos, Everson Frazão, Willian Jouse, Luan Garcia, Nathan Pessoa, Laura Fernandes, Hissa Medeiros, Cornélio Rodrigues e entre outros. Mas em especial à Zaira Bruna com a ajuda que você me concedeu nesse trabalho. E finalmente, agradeço à CAPES pelo apoio financeiro.

"Do or die, or don't try."

RNA tie club

# Resumo

Neste trabalho, propomos um modelo baseado nas estatísticas não-gaussianas para abordar as correlações estatísticas entre moléculas do DNA. O fundamento do modelo está associado às distribuições lei de potência que surgem dos formalismos de Tsallis e Kaniadakis. A abordagem assume que o tamanho de uma molécula está relacionada ao número de aminoácidos que pertencem à molécula. Assim, o modelo apresenta as seguintes características, a saber, q-distribuição e k-distribuição dos tamanhos de moléculas, e as correlações estatísticas entre os aminoácidos. A viabilidade do modelo é confirmada usando dados do *National Center for Biotechnology Information* (NCBI).

Palavras-chave: Proteína, Entropia, Tsallis, Kaniadakis.

# Abstract

In this work, we propose a model based on the non-gaussian statistics in order to address the statistical correlations among DNA molecules. The fundament of model is associated with powerlaw distributions which emerge from both Tsallis and Kaniadakis framework. The approach assumes that the size of a molecule is related to the number of aminoacid belonging to this one. Thus, the model presents the following characteristics, namely, q-distributions and k-distributions of size of molecules, and statistical correlations among aminoacids. The viability of our model is confirmed, by using data from the *National Center for Biotechnology Information* (NCBI).

Keywords: Protein; Entropy; Tsallis; Kaniadakis.

# Sumário

Li	Lista de Figuras x						
1	Introdução						
<b>2</b>	da vida: uma breve revisão	4					
	2.1	Introd	lução	. 4			
	2.2	Histór	ia do DNA	. 4			
	2.3	Ácidos	s Nucleicos	. 7			
		2.3.1	Estrutura dos Ácidos Nucleicos	. 9			
		2.3.2	Transcrição do RNA	. 10			
		2.3.3	Tradução do RNA	. 11			
		2.3.4	Código Genético	. 11			
3	For	malism	no estatístico generalizado	13			
	3.1	Introd	lução	. 13			
	3.2	Forma	lismo estatístico de Kaniadakis	. 13			
	3.3	Α κ-Á	lgebra	. 16			
		3.3.1	O $\kappa$ -Produto $\ldots$	. 17			
		3.3.2	A $\kappa$ -Soma	. 18			
3.4 Formalismo estatístico de Tsallis				. 19			
3.5 A $q$ -Álgebra			lgebra $\ldots$	. 23			
		3.5.1	O $q$ -produto	. 23			
		3.5.2	A <i>q</i> -Soma	. 26			
		3.5.3	Distribuições Generalizadas	. 27			
4	Função Distribuição e Resultados						
	4.1	Introd	lução	. 31			
	4.2	Distril	buição $q$ -Maxwelliana e $\kappa$ –Maxwelliana	. 31			
	4.3	Conju	nto de Dados	. 34			
<b>5</b>	Cor	nclusõe	es e Perspectivas	50			

## Referências Bibliográficas

51

# Lista de Figuras

2.1	Fotografia da difração de raio X, obtida por Rosalind Franklin, usando a	
	forma B de DNA [21]. $\ldots$	6
2.2	James Watson, Francis Crick, Maurice Wilkins e Rosalind Franklin [21]	6
2.3	As bases nitrogenadas dos ácidos nucleicos [22].	$\overline{7}$
2.4	Estrutura antiparalela da dupla-hélice do DNA [22]	9
2.5	Estrutura do DNA A, DNA B e DNA Z [22]	10
3.1	A função $\kappa$ -logaritmo com valores típicos para $\kappa$	15
3.2	A entropia $\kappa$ -exponencial com valor típicos para $\kappa$	16
3.3	A entropia $S_q(W)$ , no caso equiprovável, como uma função do número de estado $W$ pára valores típicos de $q$ [29]	21
3.4	A função q-exponencial com valores típicos para q. No limite $x \to 0$ , isto	
	é, $e_q^x \sim x + 1(\forall q)$ . [29]	22
4.1	A distribuição de tamanho para as proteínas do cromossomo 01 em escala	
	log-log	35
4.2	A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 01,	
	o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e	
	o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul).	36
4.3	A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 02,	
	o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e	
	o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)	36
4.4	A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 03,	
	o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e	
	o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)	37
4.5	A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 04,	
	o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e	
	o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)	37
4.6	A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 05,	
	o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e	
	o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)	38

- 4.7 A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 06, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul) . . 38
- 4.8 A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 07, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul).
- 4.9 A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 08, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul).
- 4.10 A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 09, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul).
- 4.11 A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 10, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul).
- 4.12 A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 11, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul).
- 4.13 A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 12, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul).
- 4.14 A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 13, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul).
- 4.15 A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 14, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul).
- 4.16 A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 15, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul).
- 4.17 A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 16, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul).
- 4.18 A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 17, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul) . . 44
- 4.19 A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 18, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul).

- 4.20 A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 19, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul) . . 45
- 4.21 A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 20, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul).
- 4.22 A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 21,
  o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e
  o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul) . . 46
- 4.23 A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 22, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul).
- 4.24 A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo X, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul).

## Capítulo 1

# Introdução

A Mecânica Estatística é o ramo que trata das propriedades de sistemas macroscópicos constituído por um grande número de elementos. Esta propõe investigar as propriedades microscópicas dos sistemas que descrevem as grandezas na escala macroscópica.

No século 19, o conceito de entropia foi formulado pelo físico alemão Rodolf Clausius (1822-1888) onde desempenha um papel fundamental na Mecânica Estatística e na Termodinâmica. Somente quando o físico austríaco Ludwig Boltzmann (1844-1906) propôs para os principais mecanismos mecânicos uma relação univoca entre a entropia de um sistema e a probabilidade do estado do mesmo sistema, foi possível obter uma característica física do sistema. Assim, Boltzmann relacionou a entropia do sistema com a sua probabilidade de ocorrer, resultando na relação

$$S = k_B \ln W \tag{1.1}$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann e W é o número de estados microscópicos acessíveis do sistema. Porém, a equação acima só descreve um caso particular, onde as probabilidades são equiprováveis. No caso geral, quando as probabilidades das partículas do sistema não são iguais para todos os estados acessíveis, a expressão (1.1) pode ser descrita como

$$S = -k_B \sum_{i=1}^{W} p_i \ln p_i \tag{1.2}$$

onde  $p_i$  é a probabilidade do sistema encontrar-se no *i*-ésimo estado e W é a quantidade de estados acessíveis. Essa expressão é denominada como a entropia de Shannon [1].

Embora a formulação de Boltzmann fosse útil para sistemas sem interação ou com interações de curto alcance, pesquisas têm mostrado a existência de outros sistemas de comportamento totalmente discordante com a formulação de Boltzmann.

O tratamento de sistemas fortemente correlacionados ou que apresentem interações de longo alcance precisa ser feito através de estatísticas generalizadas, uma vez que a estatística proposta por Boltzmann-Gibbs é limitada e não compreende esse tipo de sistema. Nos últimos anos, houve um esforço por parte de pesquisadores para tentar demonstrar que essas estatísticas generalizadas são, realmente, adequadas para tratar sistemas fora do equilíbrio.

As mudanças propostas por essas estatísticas em relação à estatística de Boltzmann-Gibbs estão relacionadas à forma da função distribuição, que passaria de um comportamento exponencial para uma lei de potência. Isso ocorre devido à generalização da entropia. Existem vários formalismos estatísticos generalizados, como os de Abe [2], Renyi [3], Sharma-Mittal [4] nessa dissertação porém, trataremos apenas dos formalismos estatísticos de Kaniadakis [5] e Tsallis [6].

Em 1988, surge uma importante generalização da estatística de Boltzmann que foi proposta do Constantino Tsallis [6] inspirada em conceitos de estruturas multifractais. Sendo que podemos expressar a entropia de Tsallis na forma

$$S_q = k_B \ln_q W \tag{1.3}$$

onde q é o parâmetro de modificação desse formalismo.

Em 2001, Kaniadakis [5] apresenta sua generalização para a entropia de Boltzmann. A estatística de Kaniadakis tem como um dos seus pilares, o Principio de Interação Cinética (KIP). Assim, a expressão de Kaniadakis para a entropia pode ser escrita como

$$S_{\kappa} = k_B \ln_{\kappa} W \tag{1.4}$$

onde  $\kappa$  é o parâmetro modificador de seu formalismo. Sua generalização surge de um forma natural da teoria da relatividade restrita de Einstein [7,8].

As áreas de aplicação da Física Estatística vem sendo ampliadas ao longo do século passado, principalmente nos últimos anos, permitindo o estudos de sistemas de alta complexidade e interessasses para outros campos da ciência, tais como, a Cosmologia [9], Astrofísica [10, 11], Geofísica [12] e Biologia [13].

Nos últimos anos, os dados genéticos para sequenciamento de DNA vem crescendo rapidamente. Hoje temos a possibilidade de analisar a complexidade da estrutura do DNA de vários organismos. Usando os numerosos dados genéticos podemos demonstrar vários graus de complexidade da sequência de DNA. Outro interessante aspecto da complexidade genética é a observação de correlações de longo alcance na estrutura do DNA.

Em 1992, Peng [14] conseguiu mostrar a existência de correlação de longo alcance na estrutura do DNA usando o modelo de *DNA Walk*. No mesmo ano, Li [15] e Voss [16] usaram um espectro de frequência, para quantificar essa correlações em vários organismos. Depois, uma variedade de métodos estatísticos como o modelo de caminhada de Levy [17], método linguístico [18], aproximação por wavelet [19] e análise de fractal [20, 23] foram utilizados para a estimar as correlações de longo alcance na estrutura do DNA.

Estruturamos os capítulos do nosso estudo do seguinte modo: no capítulo 2 abordamos um breve descrição histórica envolvendo o DNA e também mencionamos algumas da principais características. No capítulo 3, abordamos brevemente os formalismos generalizados, em particular, os formalismos de Tsallis e Kaniadakis e suas principais propriedades. Em seguida, no capítulo 4, abordamos a distribuição Maxwelliana e suas generalizações usando os formalismos generalizados e apresentamos os principais resultados. Finalmente, no capítulo 5, discutimos nossas principais conclusões e perspectivas desse trabalho.

### Capítulo 2

# Molécula da vida: uma breve revisão

#### 2.1 Introdução

Nenhuma outra descoberta dos tempos atuais permitiu a tantos pesquisadores a se dedicarem ao mesmo assunto quanto a descoberta da estrutura tridimensional da molécula do DNA. Atualmente, o estudo dessa molécula é relevante, trazendo benefícios significativos em áreas como: a física, biomédica, engenharia genética, agricultura e entre outras.

Nesse capítulo, veremos que o desvendamento da estrutura do DNA foi um processo que levou aproximadamente um século e discutirmos brevemente sobre o processo de desvendamento da estrutura do DNA e algumas das suas principais características.

#### 2.2 História do DNA

A história da DNA teve início no século 19 com o bioquímico suíço, Friedrich Miescher (1844-1895), com um estudo de pus em curativos fornecidos por um hospital local, descobriu a presença de um composto ácido que até o momento era desconhecido. Esse composto que era formado por moléculas grandes e rico em fósforo e nitrogênio, foi denominado como "nucleína".

Em 1880, o médico alemão Albrecht Kossel (1853-1927), demonstrou que a nucleína continha base nitrogenada na sua estrutura, assim, explicando o fato da nucleína ser rica em nitrogênio. Um ano depois, foi mostrado que a nucleína só era encontrado nos cromossomos, pelo botânico alemão Edward Zacharias (1852-1911). Nove anos depois, o médico Richard Altmann (1852 – 1900) obteve a nucleína com um alto grau de pureza, comprovando a sua natureza ácida, então, propôs a mudança do nome do composto de nucleína para ácido nucleico.

Em 1928, o médico britânico Frederick Griffith (1881-1941), então estudava o agente bacteriano da pneumonia, o *Pneumococcus*, notou que havia duas cepas<sup>1</sup>, designadas de como são observadas sob o microscópio. Essas cepas não diferenciavam só visualmente, mas também em sua virulência. Então notou-se que a cepa inofensiva (não virulenta) em contato com uma cepa infecciosa, adquire a propriedade de contaminação. Esse fenômeno

 $<sup>^1{\</sup>rm Cepas}$ em biologia e genética, refere-se a um grupo de descendentes com um ancestral comum que compartilham semelhanças morfológicas ou fisiológicas.

passou a ser chamando de *Princípio Genético de Transformação*. Na década de 1930, o bioquímico russo Phoebus Levene (1869-1940), mostrou que o DNA é uma molécula constituída por várias bases químicas distintas: adenina (A), guanina (G), timina (T), citosina (C), um grupo de fosfato e uma desoxirribose. Somente, depois de 21 anos, o bioquímico Erwin Chargaff (1905-2002), usando uma técnica de cromatografia em papel estimou as quantidades relativas aos pares de bases de adenina e timina na molécula de DNA eram iguais e o mesmo acontecia em relação ao par de citocina e guanina.

Em 1944, o bioquímico Oswald Avery (1877-1955) reproduz o experimento realizado por Griffith afim de caracterizar o agente do *Princípio Genético de Transformação*. De uma forma satisfatória, Avery decompôs os componentes bioquímicos do agente bacteriano e conseguiu mostrar que o DNA era o princípio transformador proposto por Griffith.

Em 1952, o microbiologista Alfred Hershey (1908-1997) e a genetista Martha Chase (1927-2003) apresentaram uma segunda prova que reafirma o DNA como o material genético. Hershey e Chase executaram experimentos com um vírus infectante, o *bacteriófago T2*, no intuito de mostrar que ao infectar uma bactéria com o DNA viral, o sistema bacteriano reproduziria o vírus. Então usando radioisótopos para acompanhar os componentes moleculares do bacteriófago, o DNA viral entra na célula hospedeira e orienta a sua reprodução, assim, proporcionando a evidência que DNA era a molécula responsável pela perpetuação genética.

Na década de 1950, deu-se inicio a uma corrida para determinar a forma estrutural do DNA. O químico Linus Pauling (1901-1994) propôs um modelo para o DNA com três cadeias, com uma estrutura de açúcar-fosfato, onde os fosfatos eram mantidos ligados por pontes de hidrogênio. Mas o modelo de Pauling mostrou-se ineficaz, visto que necessitaria de um meio ácido que não é encontrado nas células.

Entre 1950 e 1953, a biofísica Rosalind Franklin (1920-1958) e o físico Maurice Wilkins (1916-2004) iniciaram os estudos de geometria da molécula do DNA através do raio X. Seu trabalho confirmou que o DNA possui uma estrutura helicoidal.



Figura 2.1: Fotografia da difração de raio X, obtida por Rosalind Franklin, usando a forma B de DNA [21].

Em 1953, o físico Francis Crick (1916-2004) e o biólogo James Watson (1928) apresentaram um modelo compatível com a análise da composição química de bases de amostra hidrolisadas de DNA proposta por Chargaff e os estudos de DNA por difração de raio X obtidos por Franklin e Wilkins. A estrutura do modelo de Watson e Crick é constituído por dois filamentos de açúcar-fosfato em hélice girando para a direita.



Figura 2.2: James Watson, Francis Crick, Maurice Wilkins e Rosalind Franklin [21].

No ano de 1958, os bioquímicos Franklin Stahl (1929) e Matthew Meselson (1930) cria-

ram um experimento que demostrava que a replicação do DNA é feita por um mecanismo semiconservativo, o que representa o fenômeno da reprodução da molécula de DNA, em que uma das moléculas recém-formadas conserva uma das cadeias da molécula original de DNA e um filamento recém-sintetizando. Onde esse mecanismo pode ser comparado com um abrir de zíper.

#### 2.3 Ácidos Nucleicos

O DNA e RNA são macromoléculas orgânicas que possuem estruturas muitos similares. Ambos são grandes polímeros<sup>2</sup> com longas cadeias principais de resíduos alternados de um fosfato e cinco açúcares de carbono. Preso a cada resíduo de açúcar se encontra uma base nitrogenada. O açúcar encontrado no DNA é denominado como uma desoxirribose, enquanto no RNA, é chamado de ribose.

Os ácidos nucleicos são identificados pela suas sequências de bases. Quatro tipos de bases são comumente encontrados no DNA: adenina (A), citosina (C), guanina (G) e timina (T). O RNA também apresenta quatro tipos principais de bases, três deles, são as mesmas encontradas no DNA, mas a timina é substituída pela a uracila (U). A adenina e a guanina possuem uma estrutura de dois anéis interligados, sendo chamando purinas. Enquanto, a citosina, timina e uracila possuem um anel simples, denominado de pirimidinas



Figura 2.3: As bases nitrogenadas dos ácidos nucleicos [22].

Um gene é uma parte de uma determinada molécula de DNA, que serve como modelo para fazer uma molécula de RNA funcionalmente importante. Em organismos menos

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Polímeros são macromoléculas formadas a partir de unidades estruturais menores.

complexos, como as bactérias, o DNA é condensado com genes. Em eucariotos, as pequenas moléculas de DNA das mitocôndrias ou cloroplastos contêm poucos genes. Contudo, o núcleo muitas vezes contém milhares de genes, e eucariotos complexos normalmente apresentam dezenas de milhares. Todavia, muito do DNA consiste em sequências repetidas, cujas funções não são facilmente identificadas. Parte das sequências de DNA repetitivas mantém funções cromossômicas essenciais, mas também existem várias cópias imperfeitas de genes funcionais.

Existem vários tipos distintos de moléculas de RNA, mas eles podem ser divididos em duas classes principais. Em uma classe, cada molécula de RNA contém um sequência de RNA codificante que pode ser decodificado para gerar uma sequência polipeptídica correspondente. Como esta classe de RNA carrega informação genética do DNA para a maquinaria de síntese proteica, ela é descrita como RNA mensageiro, mRNA. O RNA mensageiro, mRNA, produzido no núcleo precisa ser exportado para ser utilizado para a produção de proteínas, mas o mRNA sintetizado na mitocôndrias e nos cloroplastos é utilizado para fabricar proteínas no interior dessas organelas. A expressão da maioria do genes é dedicada à produção de polipeptídeos e, assim, as proteínas representam o principal objetivo funcional de informação armazenada no DNA.

O fluxo de informação genética normalmente ocorre em sentido único: o DNA é transcrito para a produção de RNA, e então o RNA é utilizado para a produção de polipeptídeos que subsequentemente formam as proteínas. Em função desse universalidade, esta sequência de transmissão da informação genética foi descrita como o dogma central da biologia molecular. Dois processos são essenciais em todos os organismos celulares:

- Transcrição, pela qual o DNA é utilizado por um RNA-polimerase<sup>3</sup> como molde para sintetizar um dentre vários tipos diferente de RNA.
- Tradução, pela qual o mRNA é decodificado para produzir polipeptídeos nos ribossomos, os quais são grandes complexos de RNA-proteínas encontrados no citoplasma, bem como em mitocôndrias e cloroplastos.

A informação genética é codificada em uma sequência linear de nucleotídeos do DNA e decodificada em grupos de três nucleótidos por vez para gerar uma sequência linear de nucleotídeos no RNA. Essa sequencia é então decodificada em grupos de três nucleotídeos, códons, para gerar uma sequencia linear de aminoácidos no produto polipeptidos.

As proteínas são compostas por um ou mais polipeptídeos que podem ser modificados pela adição de cadeias laterais de carboidratos ou outros grupos químicos. Assim como o DNA e o RNA, polipeptídeos são polímeros constituídos por uma sequência linear de unidades repetidas. A unidade básica de repetição é denominada como aminoácido.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>As RNAs polimerases são enzimas responsáveis pela síntese de RNA a partir de sequências de DNA ou RNA, sendo, portanto, classificadas em RNA polimerase dependente de DNA ou RNA, respectivamente.

#### 2.3.1 Estrutura dos Ácidos Nucleicos

As moléculas de DNA e RNA apresentam cadeias principais lineares, compostas por moléculas de açúcares e fosfato. As moléculas de açúcar são unidas por ligações de 3', 5'-fosfodiéster<sup>4</sup>, nas quais um grupo de fosfato se conecta com o carbono 3' de um açúcar ao carbono 5' do próximo açúcar na cadeia açúcar-fosfato.



Figura 2.4: Estrutura antiparalela da dupla-hélice do DNA [22].

Em função do pareamento de bases, a composição de bases do DNA não é aleatória: a quantidade de A equivale à de T, e a quantidade de G equivale à de C. A composição de bases de DNA pode, portanto, ser especificada pela estimativa de porcentagem de GC (= porcentagem de G + porcentagem C) em sua composição, onde essa propriedade é conhecida como regra de Chargaff [24].

O DNA pode adotar diferentes tipos de estrutural helicoidal. A maior parte do DNA adota a forma B, ou seja, uma hélice com giro para direita que apresenta 10 pares de bases por giro. As formas mais raras são do DNA A, onde possui uma hélice com giro

 $<sup>^{4}</sup>$ Uma ligação fosfodiéster é um tipo de ligação covalente que é produzida entre dois grupos hidroxila (–OH) de um grupo fosfato e duas hidroxilas de outras duas moléculas através de uma dupla ligação éster.

para a direita apresentado 11 pares de bases por giro e o DNA Z, possuindo um hélice com giro para a esquerda com 12 pares de bases por giro.



Figura 2.5: Estrutura do DNA A, DNA B e DNA Z [22].

#### 2.3.2 Transcrição do RNA

A informação não é transferida diretamente do DNA para a proteínas, pois em uma célula eucariótica, o DNA está no núcleo, enquanto a proteína é sintetizada no citoplasma. A transferência da informação do gene utiliza o RNA, como intermediário, para sintetizar proteína.

Existem três RNA polimerases diferentes; apenas a RNA polimerase II transcreve mRNA. A RNA polimerase II não se liga diretamente ao DNA promotor, mas sim a fatores gerais de transcrição, um dos quais reconhece a sequência TATA na maioria dos promotores eucarióticos. A RNA polimerase II é uma molécula muito mais extensa e contém várias subunidades que funcionam não só para alongar o RNA transcrito primário, mas também para coordenar os amplos eventos de processamento que são necessários para produzir o mRNA final. Esses eventos de processamento são revestimento em 5', remoção de introns e união de éxons pelos spliceossimos, e clivagem em 3' seguida de poliadenilação. Parte do cerne da RNA polimerase II, o domínio da cauda carboxílica, é idealmente posicionado para interagir com o RNA nascente à medida que ele emerge da polimerase. A RNA polimerase II coordena os vários eventos de síntese e processamento do RNA.

#### 2.3.3 Tradução do RNA

A tradução da informação codifica a sequência de nucleotídeos de um mRNA na sequência de aminoácidos de uma proteína. Elas são enzimas responsáveis pelo metabolismo celular, incluindo a síntese de DNA e RNA, e são fatores reguladores necessários para a expressão do programa genético.

Os principais componentes da tradução são as três classes de RNA: tRNA, mRNA, rRNA. A precisão da tradução depende da ligação enzimática de uma aminoácido com: seu tRNA cognato, gerando uma molécula de tRNA carregada. Como adaptadores, os tRNA são moléculas-chave na tradução. Em contraste, o grande ribossomos é a fábrica onde o mRNA, tRNA carregados e outros fatores proteicos juntam-se para a síntese de proteínas.

A principal decisão na tradução é onde iniciá-la. Nos procariontes, o complexo de iniciação é montado no mRNA na sequência de Shine-Dalgarno [25]. O complexo de iniciação em eucariontes é montado na estrutura cap 5' do mRNA e move-se na direção 3' até o códon de início seja reconhecido. A fase mais longa da tradução é o ciclo de alongamento. Nessa fase, o ribossomo move-se ao longo do mRNA, revelando o códon seguinte que irá interagir com seu tRNA carregado cognato, de modo que os tRNA carregados com aminoácidos podem ser adicionados à cadeia polipeptídica crescente. Esse ciclo continua até que seja encontrado um códon de fim. Os fatores de liberação facilitam o término da tradução.

#### 2.3.4 Código Genético

O código genético é um código de trincas, havendo quatro bases possíveis para ocupar uma das três posições em um códon. Exitem,  $4^3 = 64$  códons possíveis, o que é mais que suficiente para codificar os 20 principais tipos de aminoácidos. O código genético é degenerado porque, em média, cada aminoácido é especificado por cerca de três códons diferentes. Alguns aminoácidos chegam a ser especificados por até seis códons, enquanto outros são menos representados, ver tabela (2.1). A degeneração do código genético geralmente envolve a terceira base do códon.

Códons	A.A.	Códons	A.A.	Códons	A.A.	Códons	A.A.
UUU	Б	UCU		UAU	Y	UGU	С
UUC		UCC	C	UAC		UGC	
UUA		UCA	د	UAA	Fire	UGA	Fim
UUG		UCG		UAG	гш	UGG	W
CUU		CCU		CAU	тт	CGU	
CUC		CCC	D	CAC	П	CGC	D
CUA		CCA		CAA	0	CGA	n
CUG		CCG		CAG	Q	CGG	
AUU		ACU		AAU	N	AGU	C
AUC	I	ACC		AAC		AGC	S
AUA		ACA		AAA	V	AGA	р
AUG	М	ACG		AAG	n	AGG	n
GUU	U C A V	GCU		GAU	р	GGU	
GUC		GCC		GAC	D	GGC	
GUA		GCA	A	GAA	Ð	GGA	G
GUG	1	GCG		GAG		GGG	

Tabela 2.1: O código genético designa os aminoácidos (A.A.) especificados por cada códon.

Embora mais de 60 códons possam especificar um aminoácido, o número de diferentes moléculas citoplasmáticas de tRNA é um tanto menor e apenas 22 tipos de tRNA mitocondrial são produzidos. A interpretação para a existência de mais de 60 códons e um número muito menor de tRNAs é possível pois o pareamento de bases no RNA é mais flexível do que no DNA. O pareamento de códons e anticódons segue a regra normal A-U e G-C para as duas primeiras posições do códons. Entretanto, na terceira posição existe uma certa flexibilidade, e o pareamento de bases G-U é permitido.

### Capítulo 3

# Formalismo estatístico generalizado

#### 3.1 Introdução

O tratamento de sistemas fortemente correlacionados ou que apresentem interações de longo alcance precisa ser feito através de estatísticas generalizadas, uma vez que a estatística proposta por Boltzmann-Gibbs é limitada e não compreende esse tipo de sistema. Nos últimos anos, houve um esforço por parte de pesquisadores para tentar demonstrar que essas estatísticas generalizadas são, realmente, adequadas para tratar sistemas fora do equilíbrio.

As mudanças propostas por essas estatísticas em relação à estatística de Boltzmann-Gibbs estão relacionadas à forma da função distribuição, que passaria de um comportamento exponencial para uma lei de potência. Isso ocorre devido a generalização da entropia. Existem vários formalismos estatísticos generalizados, como os de Abe [2], Renyi [3], Sharma-Mittal [4] nesse trabalho porém, trataremos apenas dos formalismos estatísticos de Kaniadakis e Tsallis.

Nesse capítulo, vamos discutir brevemente as principais características das estatísticas generalizadas de Kaniadakis [5] e Tsallis [6].

#### 3.2 Formalismo estatístico de Kaniadakis

Em 2001, Kaniadakis [5] sugere uma generalização para a estatística de Boltzmann-Gibbs que tem como base o princípio denominado de Princípio da Interação Cinética (KIP)<sup>1</sup>, onde descreve o movimento das partículas e impõe um forma para a entropia do sistema.

O formalismo de Kaniadakis está baseado na entropia generalizada,

$$S_{\kappa} = -k_B \int \frac{f(x)^{1+\kappa} - f(x)^{1-\kappa}}{2\kappa} dx = -k_B \int f(x) \ln_{\kappa} [f(x)] dx \qquad (3.1)$$

ou forma discreta,

 $<sup>^{1}</sup>$ O KIP (Kinetical Interation Principle) define uma interação coletiva especial que poder ser muito útil para descrever dinâmica de muitos corpos.

$$S_{\kappa} = -k_B \sum_{i=1}^{W} \left( \frac{p_i^{1+\kappa} - p_i^{1-\kappa}}{2\kappa} \right) = -k_B \sum_{i=1}^{W} p_i \ln_k(p_i)$$
(3.2)

com as condições de normalização

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx = 1 \quad ou \quad \sum_{i=1}^{N} p_i = 1$$
(3.3)

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $f \in p$  são funções distribuição de probabilidade para o caso contínuo e discreto, receptivamente. No limite, quando  $\kappa \to 0$ ,  $S_{\kappa}$  resgata a entropia de Boltzmann-Gibbs.

$$S_0 = -k_B \sum_{i=1}^{N} p_i \ln(p_i)$$
(3.4)

A entropia  $S_{\kappa}$  é a única que existe, côncava, aditiva, extensiva, ao lado da entropia de Boltzmann-Gibbs.

A função logaritmo da equação (3.2) é uma função generalizada, conhecida como  $\kappa$ -logaritmo, cuja a expressão é dada por

$$\ln_{\kappa}(x) = \frac{x^{\kappa} - x^{-\kappa}}{2\kappa} \tag{3.5}$$



Figura 3.1: A função  $\kappa$ -logaritmo com valores típicos para  $\kappa$ .

A  $\kappa$ -logaritmo é uma função monotonicamente crescente e côncava para  $\kappa \in (-1, 1)$  sendo  $\frac{d \ln_k(x)}{dx} > 0$  e  $\frac{d^2 \ln_\kappa(x)}{dx^2} < 0$  e satisfaz a relação

$$\ln_{\kappa}(x) = \ln_{-\kappa}(x) \tag{3.6}$$

No limite  $\kappa \to 0$ a função  $\kappa\text{-logaritmo}$  reduz-se para o logaritmo padrão.

A distribuição generalizada de Kaniadakis é baseada em uma função exponencial generalizada, chamada de  $\kappa$ -exponencial, sendo a função inversa da  $\kappa$ -logaritmo, definida como

$$\exp_{\kappa}(x) = \left[\sqrt{1 + (\kappa x)^2} + \kappa x\right]^{\frac{1}{\kappa}}$$
(3.7)

A  $\kappa$ -exponencial é uma função real monotonicamente crescente e côncava, e obedece a relação

$$\exp_{\kappa}(x) = \exp_{-\kappa}(x) \tag{3.8}$$

Consequentemente, quando  $\kappa \to 0$  a  $\kappa$ -exponencial recai na exponencial padrão.



Figura 3.2: A entropia  $\kappa$ -exponencial com valor típicos para  $\kappa$ .

# 3.3 A $\kappa$ -Álgebra

Nessa seção vamos discutir algumas propriedade desenvolvidas a partir do formalismo estatístico de Kaniadakis. Para isso, precisamos considerar um função real  $g_{\kappa}(x)$ , para uma variável x, que podemos chamar de gerador de deformação, utilizando as seguintes propriedades

- 1.  $g_{\kappa}(x) \in \mathbb{R};$
- 2.  $g_{\kappa}(-x) = -g_{\kappa}(x);$
- 3.  $\frac{dg_{\kappa}(x)}{dx} > 0;$
- 4.  $g_{\kappa}(\pm \infty) = \pm \infty;$
- 5.  $g_{\kappa}(x) \approx x$ , para  $x \to 0$ .

Vamos construir uma função real  $x_{\kappa}$  para a variável real x e dependente do parâmetro real  $\kappa$ . A função  $x_{\kappa}$  é definida de maneira arbitraria como

$$x_{\kappa} = \frac{1}{\kappa} \operatorname{arcsinh}[g_{\kappa}(\kappa x)] \tag{3.9}$$

A função  $x_{\kappa}$  apresenta todas as propriedades da função geradora  $g_{\kappa}(\kappa)$  e possui algumas outras adicionais

1. 
$$x_{\kappa} \in \mathbb{R};$$

- 2.  $(-x)_{\kappa} = -x_{\kappa};$
- 3.  $\frac{dx_{\kappa}(x)}{dx} > 0;$
- 4.  $(\pm \infty)_{\kappa} = \pm \infty;$
- 5.  $x_{\kappa} \approx x$ , para  $x \to 0$  e portanto  $0_{\kappa} = 0$ ;
- 6.  $x_{\kappa} \approx x$ , para  $\kappa \to 0$  e portanto  $x_0 = x$ ;
- 7.  $x_{-\kappa} = x_{\kappa}$

Assim podemos definir  $x^{\kappa}$  como a função inversa para  $x_{\kappa}$ , através de  $(x^{\kappa})_{\kappa} = (x_{\kappa})^{\kappa} = x$ , que assume a forma

$$x^{\kappa} = \frac{1}{\kappa} g_{\kappa}^{-1} [\sinh(\kappa x)] \tag{3.10}$$

#### 3.3.1 O *k*-Produto

O  $\kappa\text{-}\mathrm{produto}$ é definido como

$$x \overset{\kappa}{\otimes} y = x_{\kappa} \cdot y_{\kappa} \tag{3.11}$$

O  $\kappa$ -produto reduz-se para o produto ordinário quando  $\kappa \to 0$ , isto é,  $x \overset{0}{\otimes} y = xy$ .

1. O  $\kappa$ -produto obedece a lei da associatividade

$$(x \overset{\kappa}{\otimes} y) \overset{\kappa}{\otimes} z = x \overset{\kappa}{\otimes} (y \overset{\kappa}{\otimes} z)$$
(3.12)

2. Possui um elemento neutro

$$x \overset{\kappa}{\otimes} I = I \overset{\kappa}{\otimes} x = x \tag{3.13}$$

sendo o elemento neutro  $I=1^\kappa$ 

- 3. Também apresenta um elemento inverso
  - $x \overset{\kappa}{\otimes} \bar{x} = \bar{x} \overset{\kappa}{\otimes} x = I \tag{3.14}$

o elemento inverso é definido como  $\bar{x} = (\frac{1}{x_{\kappa}})^{\kappa}$ 

4. O  $\kappa$ -produto é comutativo

$$(x \overset{\kappa}{\otimes} y) = (y \overset{\kappa}{\otimes} x) \tag{3.15}$$

5. A  $\kappa\text{-divisão}\overset{\kappa}{\oslash}$ é definida como

$$x \overset{\kappa}{\oslash} y = x \overset{\kappa}{\otimes} \overline{y} \tag{3.16}$$

6. É associativo sob a aplicação da  $\kappa$ -exponencial

$$\exp_{\kappa}(x+y) = \exp_{\kappa}(x) \overset{\kappa}{\otimes} \exp_{\kappa}(y) \tag{3.17}$$

7. Aditivo sob o $\kappa\text{-logaritmo}$ 

$$\ln_{\kappa}(x \overset{\kappa}{\otimes} y) = \ln_{\kappa}(x) + \ln_{\kappa}(y) \tag{3.18}$$

#### 3.3.2 А к-Soma

A  $\kappa\text{-soma}$  é definida como

$$x \stackrel{\kappa}{\oplus} y = x\sqrt{1 + (\kappa y)^2} + y\sqrt{1 + (\kappa x)^2} = x_{\kappa} + y_{\kappa}$$
(3.19)

A  $\kappa$ -soma reduz-se para a soma ordinária quando  $\kappa \to 0$ , isto é,  $x \stackrel{0}{\oplus} y = x + y$ .

A  $\kappa$ -soma possui as seguintes propriedades:

1. A  $\kappa$ -soma obedece a lei da associatividade

$$(x \stackrel{\kappa}{\oplus} y) \stackrel{\kappa}{\oplus} z = x \stackrel{\kappa}{\oplus} (y \stackrel{\kappa}{\oplus} z)$$
(3.20)

2. Apresenta um elemento neutro

$$(x \stackrel{\kappa}{\oplus} 0) = (0 \stackrel{\kappa}{\oplus} x) = x \tag{3.21}$$

3. Possui um elemento oposto

$$x \stackrel{\kappa}{\oplus} (-x) = (-x) \stackrel{\kappa}{\oplus} x = 0 \tag{3.22}$$

4. A  $\kappa$ -soma é comutativa

$$(x \stackrel{\kappa}{\oplus} y) = (y \stackrel{\kappa}{\oplus} x) \tag{3.23}$$

5. A  $\kappa\text{-diferença} \stackrel{\kappa}{\ominus}$ é definida como

$$x \stackrel{\kappa}{\ominus} y = x \stackrel{\kappa}{\oplus} (-y) \tag{3.24}$$

A  $\kappa$ -soma surge naturalmente de um efeito relativístico e podemos utilizar a teoria da relatividade restrita de Einstein para mostrar a motivação para generalizar a estatística de Maxwell-Boltzmann. De fato, a generalização segue do teorema da adição relativística de velocidades [7,8]

$$v_1 \stackrel{c}{\oplus} v_2 = \frac{v_1 + v_2}{1 + \frac{v_1 v_2}{c^2}} \tag{3.25}$$

Neste contexto, o cálculo deformado pelo parâmetro  $\kappa$  se torna a base matemática para a estatística de Kaniadakis.

Recentemente, o conceito da entropia de Kaniadakis foi ampliado para o contexto de sistemas complexos. A  $\kappa$ -entropia foi aplicada em sistemas complexos e DNA [26], bem como no domínio da física nuclear [27]. O modelo estatístico baseado na maximização da  $\kappa$ -entropia segue de

$$\delta S_{\kappa}^{*} = \delta \left( S_{\kappa} + \alpha \sum_{x} P(x) + \beta \sum_{x} x P(x) \right)$$
(3.26)

onde  $\alpha$  e  $\beta$  são os multiplicadores de Lagrange e a  $\kappa$ -entropia é definida como

$$S_{\kappa} = -\frac{1}{2\kappa} \sum_{x} \left[ \frac{1}{1+\kappa} P(x)^{1+\kappa} - \frac{1}{1-\kappa} P(x)^{1-\kappa} \right]$$
(3.27)

Aqui, os vínculos são a normalização da distribuição e o valor médio da variável aleatória x, dada por [28]

$$\sum_{x} P(x) = 1 \qquad e \qquad \sum_{x} x P(x) = \langle x \rangle \tag{3.28}$$

Na próxima seção, introduziremos outra estatística não-gaussiana, a chamada estatística de Tsallis. De fato, a revisão de ambas estatísticas objetiva contextualizar tais modelos, pois usaremos estas num problema de distribuição de comprimentos do DNA.

#### 3.4 Formalismo estatístico de Tsallis

O conceito de entropia proposto por Tsallis [6] em 1998 fornece um generalização da entropia proposta por Boltzmann-Gibbs. Esta formulação tem como ponto de partida o conceito e estrutura de multifractal<sup>2</sup> que é associada com um parâmetro livre q descrevendo o comportamento generalizado.

 $<sup>^2 \</sup>rm Um$ sistema multifractal é uma generalização de um sistema fractal em que um único expoente (dimensão fractal) não é suficiente para descrever sua estrutura.

A entropia no formalismo de Tsallis é definida como

$$S_q = k_B \left( \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i^q}{q - 1} \right) = -k_B \sum_{i=1}^W p_i^q \ln_q(p_i). \quad (q \in \mathbb{R})$$
(3.29)

Com a condição de normalização,

$$\sum_{i=1}^{W} p_i = 1 \tag{3.30}$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $W \in \mathbb{N}$  é o número de total de configurações possíveis,  $p_i$  é função distribuição de probabilidade. A entropia dada pela equação (3.29) é dita não-aditiva, sendo a base da mecânica estatística não-extensiva.

No limite de  $q \rightarrow 1$  a equação (3.29) se reduz para a entropia padrão de Boltzmann-Gibbs,

$$S_1 = -k_B \sum_{i=1}^{W} p_i \ln(p_i)$$
(3.31)

No caso equiprovável, onde as probabilidades são iguais, temos  $p_i = \frac{1}{W}$  ( $\forall i$ ), a equação (3.29) pode ser escrita na seguinte forma

$$S_q = k_B \ln_q(W). \tag{3.32}$$

Na figura (3.3), mostramos a q-entropia em função do número de estados acessíveis para valores selecionados do parâmetro entrópico q.



Figura 3.3: A entropia  $S_q(W)$ , no caso equiprovável, como uma função do número de estado W pára valores típicos de q [29].

A entropia proposta por Tsallis, não obedece o princípio de aditividade da entropia padrão. Se consideramos um sistema composto por dois subsistemas  $(A) \in (B)$  a entropia de Tsallis para esse sistema composto é definida como

$$\frac{S_q(A+B)}{k_B} = \frac{S_q(A)}{k_B} + \frac{S_q(B)}{k_B} + (1-q)\frac{S_q(A)}{k_B}\frac{S_q(B)}{k_B},$$
(3.33)

mostrando a propriedade da não-aditividade explicitamente no termo cruzado,

$$(1-q)\frac{S_q(A)}{k_B}\frac{S_q(B)}{k_B}.$$
(3.34)

Quando o  $q \rightarrow 1$  recuperamos a propriedade de aditividade.

$$S_1(A+B) = S_1(A) + S_1(B)$$
(3.35)

No caso em que q<1

$$S_q(A+B) > S_1(A+B),$$
 (3.36)

o sistema é dito super-aditivo. Já para q > 1,

$$S_q(A+B) < S_1(A+B)$$
(3.37)

o sistema é sub-aditivo.

O formalismo generalizado de Tsallis tem como base duas funções generalizadas, chamadas de q-logaritmo e q-exponencial, respectivamente. Essas funções têm uma relevância dentro de toda a teoria. Sendo o q-logaritmo definido como

$$\ln_q(x) = \frac{x^{1-q} - 1}{1-q} \qquad (\forall q, x > 0)$$
(3.38)

A função q-exponencial, sendo a função inversa da q-logaritmo, é definida como,

$$\exp_q(x) = [1 + (1 - q)x]^{\frac{1}{1 - q}}.$$
(3.39)

Na figura 3.4, mostramos a função q-exponencial para alguns valores do parâmetro q.



Figura 3.4: A função q-exponencial com valores típicos para q. No limite  $x \to 0$ , isto é,  $e_q^x \sim x + 1(\forall q)$ . [29]

# 3.5 A q-Álgebra

Nessa seção discutiremos algumas propriedades da álgebra desenvolvida a partir do formalismo estatístico de Tsallis, apresentando alguns resultados que são importantes para a consistência matemática desse formalismo. Para começar, vamos analisar o q-produto.

#### 3.5.1 O q-produto

Podemos definir o q-produto como sendo

$$x \bigotimes_{q} y = \left[ x^{1-q} + y^{1-q} - 1 \right]^{1/(1-q)}, \quad (x, y > 0),$$
(3.40)

ou ainda:

$$x \underset{q}{\otimes} y = \exp_{q}^{\ln_{q} x + \ln_{q} y}.$$
(3.41)

São propriedades do q-produto:

a) O produto padrão é um caso particular do  $q\mbox{-}{\rm produto}.$  Sendo assim

$$x \underset{1}{\otimes} y = xy. \tag{3.42}$$

b) O q-produto é comutativo, logo

$$x \underset{q}{\otimes} y = y \underset{q}{\otimes} x. \tag{3.43}$$

c) Também é aditivo sob a aplicação da função q-logaritmo

$$\ln_q\left(x \underset{q}{\otimes} y\right) = \ln_q(x) + \ln_q(y). \tag{3.44}$$

Enquanto que

$$\exp_q(x) \bigotimes_q \exp_q(y) = \exp_q(x+y)$$
$$\exp_q(x) \exp_q(y) = \exp_q\left[x+y+(1-q)xy\right].$$
(3.45)

d) Possui a propriedade da dualidade inversa<br/> 2-q:

O q-produto é definido de tal forma que nos permita a seguinte operação

$$\frac{1}{x \bigotimes_{q} y} = \left(\frac{1}{x}\right) \bigotimes_{2-q} \left(\frac{1}{y}\right),\tag{3.46}$$

em que chamamos  $2-q=q^{\ast}.$  Essa dualidade nos permite também definir

$$x^{q-1}\ln_q x = \ln_{q^*} x. ag{3.47}$$

e) O q-produto é associativo

$$\left(x \bigotimes_{q} \left(y \bigotimes_{q} z\right)\right) = \left(\left(x \bigotimes_{q} y\right) \bigotimes_{q} z\right)$$
(3.48)

contando que  $x \underset{q}{\otimes} y$  e  $y \underset{q}{\otimes} z$  sejam diferentes de zero e não convirjam ao infinito.

f) Admite o elemento nulo sob algumas condições

$$x \bigotimes_{q} 0 = \begin{cases} 0, & \text{se } (q \ge 1, \ x \ge 0) \text{ ou } (q < 1, \ 0 \le x \le 1) \\ (x^{1-q} - 1)^{1/1-q}, & \text{se } q < 1 \ e \ x > 1 \end{cases}$$

g) Admite o elemento neutro 1

$$x \underset{q}{\otimes} 1 = [x^{1-q} + 1^{1-q} - 1]^{1/1-q}$$
  
= x. (3.49)

Também temos que

$$x \bigotimes_{q} \left( 1 \bigotimes_{q} x \right) = 1, \quad \text{se } 0 \le x^{1-q} \le 2$$

$$\left[ x^{1-q} + \left( 1 \bigotimes_{q} x \right)^{1-q} - 1 \right]_{+}^{1/1-q} = 1$$

$$1 \bigotimes_{q} x = \left[ 2 - x^{1-q} \right]_{+}^{1/1-q}, \quad x, y > 0$$

$$0 \quad 1 \bigotimes_{q} 0 \quad \text{n ilde{a} o diverge se } q < 1.$$

$$(3.50)$$

A q-divisãopode então ser definida como sendo

$$\begin{aligned} x \otimes_{q} y &= x \otimes_{q} \left( 1 \otimes_{q} y \right) \\ &= \left[ x^{1-q} + \left( 2 - y^{1-q} \right) - 1 \right]^{1/1-q} \\ &= \left[ x^{1-q} - y^{1-q} + 1 \right]^{1/1-q}, \quad x, y > 0, \end{aligned}$$
 (3.51)

que também satisfaz

$$x \bigotimes_{q} y = 1 \bigotimes_{q} y \left( y \bigotimes_{q} x \right), \tag{3.52}$$

desde que

$$x^{1-q} \le 1 + y^{1-q}.g \tag{3.53}$$

Uma vez que

$$x \bigotimes_{q} \left( y \bigotimes_{q} z \right) = \left( x \bigotimes_{q} y \right) \bigotimes_{q} z = \left( x \bigotimes_{q} z \right) \bigotimes_{q} y, \tag{3.54}$$

 $\operatorname{sendo}$ 

$$z^{1-q} - 1 \le y^{1-q} \le x^{1-q} + 1, \tag{3.55}$$

podemos dizer que

$$\circ \quad \ln_q(xy) = \ln_q x \bigoplus_q \ln_q y, \quad \exp_q(x) \exp_q(y) = \exp_q(x \bigotimes_q y)$$
  

$$\circ \quad \ln_q(x/y) = \ln_q x \bigoplus_q \ln_q y, \quad \exp_q(x) / \exp_q(y) = \exp_q(x \bigoplus_q y)$$
  

$$\circ \quad \ln_q(x \bigoplus_q y) = \ln_q x - \ln_q y, \quad \exp_q(x) \bigotimes_q \exp_q(y) = \exp_q(x - y).$$

Agora vamos analisar as propriedades da q-Soma.

#### 3.5.2 A q-Soma

Definimos a q-soma como sendo

$$x \bigoplus_{q} y \equiv x + y + (1 - q) xy.$$
(3.56)

- A q-soma possui ainda as seguintes propriedades
  - a) A soma usual como sendo um caso particular

$$x \bigoplus_{1} y = x + y. \tag{3.57}$$

b) A q-soma é comutativa

$$x \bigoplus_{q} y = y \bigoplus_{q} x. \tag{3.58}$$

c) É multiplicativa sob a ação da q-exponencial

$$\exp_q(x \bigoplus_q y) = \exp_q(x) \exp_q(y). \tag{3.59}$$

d) A q-soma é associativa

$$\begin{pmatrix} x \oplus \left(y \oplus z\right) \end{pmatrix} = \left( \left(x \oplus y\right) \oplus z \right) \\ = x + y + z + (1 - q) \left(xy + xz + yz\right) + (1 + q)^2 xyz.$$

A q-soma não é distributiva em relação a multiplicação.

e) Possui elemento neutro

$$x \bigoplus_{q} 0 = x, \tag{3.60}$$

com a possibilidade de definir o inverso aditivo como sendo

$$\bigoplus_{q} x = \frac{-x}{1 + (1 - q)x}; \quad x \neq 1/(q - 1).$$
(3.61)

Definimos então a q-diferença

$$\begin{aligned} x &\underset{q}{\ominus} y &= x \underset{q}{\oplus} \left( \underset{q}{\ominus} y \right) \\ &= \frac{x - y}{1 + (1 - q) y}, \quad y \neq 1/(q - 1). \end{aligned}$$
 (3.62)

A *q*-diferença obedece as propriedades de comutatividade e associatividade  $x \underset{q}{\ominus} y = y \underset{q}{\ominus} x \mathrel{e} x \underset{q}{\ominus} (y \underset{q}{\ominus} z) = (x \underset{q}{\ominus} y) \underset{q}{\ominus} z$ , porém  $a(x \underset{q}{\ominus} y) \neq (ax \underset{q}{\ominus} ay)$ .

Tendo definido o q-Produto e a q-Soma, temos a estrutura da Álgebra.

#### 3.5.3 Distribuições Generalizadas

Nesta seção, são tratados alguns exemplos de distribuições generalizadas desenvolvida a partir do formalismo estatístico de Tsallis no qual generalizam distribuições importantes existentes na literatura. Assim, vamos analisar discutir a distribuição canônica e a qdistribuição de velocidades.

#### Distribuição Canônica

A maximização da entropia de Tsallis, considerando os vínculos da normalização e do valor médio de uma variável aleatória, fornece um distribuição tipo lei de potência [30].

No contexto termodinâmico, a q-entropia

$$S_q = -k_B \sum_{i=1}^{W} p_i^q \ln_q(p_i)$$
(3.63)

junto com os vínculos [31] da normalização e o valor médio da energia,

$$\sum_{i} p_i = 1, \qquad U = \frac{\sum_{i} p_i^q E_i}{\sum_{i} p_i^q}$$
(3.64)

é maximizada, levando às chamadas distribuições Escort,

$$p_{i} = \left[1 + (q-1)\frac{\beta_{i}}{\sum_{j} p_{j}^{q}} (E_{i} - U)\right]^{\frac{1}{1-q}}$$
(3.65)

Recentemente, mostrou-se que devido à estrutura matemática dos funções q-exponencial e q-logaritmo, os vínculos necessários para a maximização são [32]

$$\sum_{i} p_i = 1, \qquad U = \sum_{i} p_i E_i; \qquad (3.66)$$

portanto, a distribuição escort sendo descartada no cálculo da maximização da q-entropia.

#### A q-distribuição de velocidades

Selecionando uma molécula arbitraria de um gás homogêneo em equilíbrio térmico a temperatura T com as componentes de velocidades  $v_x$ ,  $v_y \in v_z$ , a probabilidade que a primeira componente possua um entre  $v_x \in v_x + dv_x$  é proporcional a

$$f(v_x)dv_x,\tag{3.67}$$

onde a quantidade de  $F(v_x)dv_x$  é o número médio de partículas por unidade de volume, com velocidade no elemento  $dv_x$  sobre  $v_x$  [50].

Naturalmente, o mesmo se aplica para a demais componentes  $v_y \in v_z$ , pois na ausência de campos externos não existe uma direção privilegiada no espaço. Entretanto, a evidência que o valor provável de  $v_y$  não é afetado pela a distribuição de  $v_x$  não é direta.

A probabilidade de que a velocidade  $\vec{v}$  estará dentro do elemento de volume  $dv_x dv_y dv_z$ é dada por

$$f(v_x)f(v_y)f(v_z)dv_xdv_ydv_z, (3.68)$$

e considerando o fato de que as componentes são todas igualmente prováveis, podemos introduzir uma função desconhecida F, que é dependente somente do módulo da velocidade

$$F\left(V\right)dv_{x}dv_{y}dv_{z},\tag{3.69}$$

onde  $V = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}$ . Podemos considerar uma distribuição tridimensional e dependente apenas do módulo da velocidade tal que

$$F(V) d^{3}v = f(v_{x})f(v_{y})f(v_{z})dv_{x}dv_{y}dv_{z}.$$
(3.70)

Na dedução apresentada a seguir propomos uma q-generalização da equação 3.70.

$$F(V) d^{2}v = \exp_{q}(f^{q-1}(v_{x}) \ln_{q} f(v_{x}) + f^{q-1}(v_{y}) \ln_{q} f(v_{y}) + f^{q-1}(v_{z}) \ln_{q} f(v_{z})) dv_{x} dv_{y} dv_{z}.$$
(3.71)

onde as funções q-exponencial e q-logaritmo são definidas em (3.5) e (3.8) receptivamente. No limite  $q \to 1$  a equação (3.71) é retorna para a equação (3.70). Aplicando em (3.71) a q-log diferenciação e derivando com repeito a  $v_x$ , obtemos

$$\frac{\partial \ln_q F(V)}{\partial v_x} = \frac{\partial \ln_q [\exp_q(f^{q-1}(v_x) \ln_q f(v_x) + f^{q-1}(v_y) \ln_q f(v_y) + f^{q-1}(v_z) \ln_q f(v_z))]}{\partial v_x} (3.72)$$

ou equivalentemente,

$$\frac{1}{V}\frac{F'(V)}{F^q(V)} = \frac{1}{v_x}\frac{\partial[f^{q-1}(v_x)\ln_q f(v_x)]}{\partial v_x},\tag{3.73}$$

onde F'(V) significa derivada total. Uma equação equivalente será obtida repetindo-se o cálculo para as componentes restantes. Introduzindo a seguinte notação

$$\Phi(V) = \frac{1}{V} \frac{F'(V)}{F^q(V)},$$
(3.74)

podemos reescrever (3.73) na forma

$$\Phi(V) = \frac{1}{v_x} \frac{\partial [f^{q-1}(v_x) \ln_q f(v_x)]}{\partial v_x} = \frac{1}{v_y} \frac{\partial [f^{q-1}(v_y) \ln_q f(v_y)]}{\partial v_y}$$

$$= \frac{1}{v_z} \frac{\partial [f^{q-1}(v_z) \ln_q f(v_z)]}{\partial v_z}$$
(3.75)

Tomaremos  $\Phi(V) = -m\gamma$ , onde *m* é massa das partículas e  $\gamma$  uma constante arbitrária. Podemos também escrever a relação  $f^{q-1} \ln_q f(v_x) = \ln_{q^*} f(v_x)$ , onde  $q^* = 2 - q$ . As soluções gerais para  $f(v_x)$ , e similarmente, com expressões equivalentes para  $f(v_y)$  e  $f(v_z)$ , são dadas por

$$\ln_{q^*} f(v_x) = -\frac{m\gamma v_x^2}{2} + \ln_{q^*} A$$
(3.76)

onde, consideramos a constante de integração numa forma mais conveniente. Aplicando a q-exponencial em ambos os lados de (3.76), obtemos

$$f(v_x) = \left[1 + (1 - q^*) \left(\ln_{q^*} A - \frac{\gamma m v_x^2}{2}\right)\right]^{\frac{1}{(1 - q^*)}},$$
(3.77)

de forma que definindo uma nova constante  $\beta$ , como

$$\beta = \frac{\gamma}{1 + (1 - q^*) \ln_{q^*}} A = \frac{\gamma}{A^{1 - q^*}},$$
(3.78)

obtemos a seguinte expressão generalizada para a função de distruibuição não-extensiva

$$f(v_x) = A_q \left[ 1 - (q-1)\frac{\beta m v_x^2}{2} \right]^{\frac{1}{q-1}}$$
(3.79)

onde o subíndice q expressa a q-dependência da constante de normalização A. Naturalmente, é fácil ver que a distribuição completa satisfaz

$$F(V) d^{3}v = \exp_{q^{*}}(\ln_{q^{*}} f(v_{x}) + \ln_{q^{*}} f(v_{y}) + \ln_{q^{*}} f(v_{z}))dv_{x}dv_{y}dv_{z}.$$
(3.80)

Portando, repetindo o mesmo procedimento algébrico do caso unidimensional, resulta que

$$F_q(V) = B_q \left[ 1 - (q-1)\frac{\beta m V^2}{2} \right]^{\frac{1}{q-1}}$$
(3.81)

onde  $B_q$  está fixada pela condição de normalização tridimensional.

Como apresentamos, o formalismo de Tsallis possui uma estrutura matemática consistente, sendo bem fundamentada no contexto matemático. Por outro lado, a q-estatística tem sido usada como uma ferramenta estatística no contexto de sistemas complexos [34]. Em particular, podemos citar aplicações que abrangem desde sistemas gravitacionais [35] até a complexidade de sistemas como a molécula de DNA [13].

### Capítulo 4

# Função Distribuição e Resultados

#### 4.1 Introdução

Nesse capítulo, mostraremos a dedução das distribuições q-Maxwellina e  $\kappa$ -Maxwellina , utilizando formalismos generalizados de Tsallis e Kaniadakis, sem a necessidade da utilização da q-álgebra e  $\kappa$ -álgebra. Utilizando como base a definição da q-distribuição de velocidades para uma molécula de um gás descrita no capítulo anterior, vamos propor para uma modelo tridimensional para o comprimento das proteínas utilizando os formalismos de Tsallis e Kaniadakis.

E por fim, usando os mesmo princípios propostos por Soares [10] e Carvalho [36], faremos uma comparação dessas duas distribuições generalizadas.

#### 4.2 Distribuição q-Maxwelliana e $\kappa$ -Maxwelliana

Supondo que num volume V, cada proteína tem um comprimento entre  $[\vec{l}, \vec{l}+d\vec{l}]$ . Dessa forma, considerando a probabilidade de que  $l_i$  que situa-se no intervalo de  $[l_i, l+dl_i]$ , onde i = x,y,z. Vamos assumir que a distribuição pode ser decomposta em suas componentes nos eixos do plano cartesiano, sendo que a distribuição para cada componente é independente para das outras componentes. Assim, podemos escrever a distribuição como

$$F(l)d^3l = f(l_x)f(l_y)f(l_z)dl_xdl_ydl_z$$

$$(4.1)$$

com,  $\vec{l} = l_x \hat{i} + l_y \hat{j} + l_z \hat{k}$  e  $l = \sqrt{l_x^2 + l_y^2 + l_z^2}$ .

Assim, utilizando os formalismos generalizados de Tsallis e Kaniadakis, podemos escrever

$$F(l)d^{3}l = \exp_{\xi} \left\{ \ln_{\xi} \left[ f(l_{x}) \right] + \ln_{\xi} \left[ f(l_{y}) \right] + \ln_{\xi} \left[ f(l_{z}) \right] \right\} dl_{x} dl_{y} dl_{z}$$
(4.2)

no qual  $\xi$  é o parâmetro livre de modificação, onde  $\xi = q, \kappa$ . Assim, quando  $\xi$  assumir o valor de q, utilizaremos o formalismo de Tsallis e, sempre que,  $\xi$  assumir o valor  $\kappa$  será utilizando formalismo de Kaniadakis.

Notando que, no limite de  $\xi \to 1$ , ou  $\xi \to 0$ , as funções logaritmo e exponencial

generalizadas reduzem-se para as funções logaritmo e exponencial padrão e recuperamos a forma padrão (4.1).

Com a intenção de determinar a funções de distribuições F e f, aplicaremos um logaritmo generalizado na equação (4.2) e derivaremos em relação  $l_i$ 

$$\frac{\partial \ln_{\xi}[F(l)]}{\partial l_{i}} = \frac{\partial \ln_{\xi}[f(l_{i})]}{\partial l_{i}}$$
(4.3)

por consequência, obtemos a relação

$$\frac{\partial \ln_{\xi}[F(l)]}{\partial F(l)} \frac{dF(l)}{dl} \frac{1}{l} = \frac{1}{l_i} \frac{\partial \ln_{\xi}[f(l_i)]}{\partial l_i}$$
(4.4)

Notamos que o lados esquerdo da equação (4.4) é constante independente de qual índice seja utilizado. Assim, podemos fazer,

$$\Phi_{\xi}(l) = \frac{1}{l} \frac{\partial \ln_{\xi}[F(l)]}{\partial F(l)} \frac{dF(l)}{dl}$$
(4.5)

Dessa forma, podemos igualar a equação (4.5) com a equação (4.4),

$$\Phi_{\xi}(l) = \frac{1}{l_i} \frac{\partial \ln_{\xi}[f(l_i)]}{\partial l_i}$$
(4.6)

A equação (4.6) pode ser satisfeita se todos os seus membros são iguais a mesma constante, não dependendo de qualquer das componentes do vetor  $\vec{l}$ .

No formalismo de Tsallis, quando  $\xi = q$ , podemos fazer  $\Phi_q(l) = -\gamma$ , onde o sinal foi introduzido para satisfazer a condição de normalização. Desse modo, escrevendo a equação (4.6)

$$\frac{\partial \ln_q[f(l_i)]}{\partial l_i} = -\gamma l_i, \qquad f(l_i) = \exp_q\left[-\gamma \frac{l_i^2}{2} + \ln_q(A)\right]$$
(4.7)

onde, consideramos a constante de integração A numa forma mais conveniente. Obtemos,

$$f(l_i) = \left\{ 1 - (1 - q) \left[ \ln_q(A) - \gamma \frac{l_i^2}{2} \right] \right\}^{\frac{1}{1 - q}}$$
(4.8)

Afim de estipular um valor para a constante  $\gamma$ , definiremos uma nova constante, como

$$\frac{2}{\sigma_q^2} \equiv \frac{\gamma}{1 + (1-q)\ln_q(A)} = \frac{\gamma}{A^{1-q}}$$

$$\tag{4.9}$$

onde o parâmetro  $\sigma_q$ é a largura da distribuição no formalismo de Tsallis, aplicando a

equação (4.9) em (4.8)

$$f(l_i) = A_q \left[ 1 - (1-q) \frac{l_i^2}{\sigma_q^2} \right]^{\frac{1}{1-q}}$$
(4.10)

Vamos utilizar o índice q para mostrar a dependência de q para a constante A. Para obter a probabilidade em função de l no intervalo [l, l + dl] pode ser determinado, como

$$F(l) = \int f(l)d^3l. \tag{4.11}$$

Podemos escrever a equação (4.11) para um dado l, tal como

$$F_q(l) = \int \int A_q \left[ 1 - (1-q) \frac{l^2}{\sigma_q^2} \right]^{\frac{1}{1-q}} l^2 \sin(\theta) d\theta d\varphi$$

$$(4.12)$$

onde,  $d^3l = l^2 \sin(\theta) d\theta d\phi dl$ . Posteriormente a integração, obtemos,

$$F_q(l) = 4\pi A_q l^2 \left[ 1 - (1-q) \frac{l^2}{\sigma_q^2} \right]^{\frac{1}{1-q}}$$
(4.13)

Dessa maneira, podemos propor que a função distribuição no formalismo de Tsallis,

$$\phi_q(l) = B_q l \left[ 1 - (1-q) \frac{l^2}{\sigma_q^2} \right]^{\frac{1}{1-q}}$$
(4.14)

onde  $B_q$  é uma constante com um dependência no parâmetro q que pode ser determinada após a normalização do função  $\phi_q(l)$ .

Depois disso, utilizando o formalismo de Kaniadakis, quando  $\xi = \kappa$ , para obter a distribuições F e f. Desse modo, podemos fazer  $\Phi_{\kappa}(l) = -\frac{2}{\sigma_{\kappa}^2}$ , onde o sinal foi introduzido para satisfazer a condição de normalização, e o fator  $\frac{2}{\sigma_{\kappa}^2}$  por conveniência matemática, enquanto o parâmetro  $\sigma_{\kappa}$  é a largura da distribuição no formalismo de Kaniadakis.

$$\frac{1}{l_i} \frac{d \ln_{\kappa}[f(l_i)]}{dl_i} = -\frac{2}{\sigma_{\kappa}}, \qquad f(l_i) = \exp_{\kappa} \left(-\frac{l_i^2}{\sigma_{\kappa}^2}\right)$$
(4.15)

Com isso, é possível mostrar que a distribuição F(l) é dada por,

$$F(l) = \exp_{\kappa} \left( -\frac{l^2}{\sigma_{\kappa^2}} \right) \tag{4.16}$$

Para obter a probabilidade em função de lno intervalo  $\left[l,l+dl\right]$  pode ser determinado, como

$$F(l) = \int f(l)d^3l \tag{4.17}$$

Podemos escrever a equação (4.17) para um dado l, tal como

$$F_{\kappa}(l) = \int \int \left\{ \sqrt{1 + \left[\kappa \left(\frac{l^2}{\sigma_{\kappa}^2}\right)\right]^2} - \kappa \frac{l^2}{\sigma_{\kappa}^2} \right\}^{\frac{1}{\kappa}} l^2 \sin(\theta) d\theta d\varphi$$
(4.18)

onde,  $d^3l = l^2 \sin(\theta) d\theta d\varphi dl$ . Depois da integração, obtemos,

$$F_{\kappa}(l) = 4\pi l^2 \exp_{\kappa} \left( -\frac{l^2}{\sigma_{\kappa}^2} \right)$$
(4.19)

e vamos propor a distribuição no formalismo de Kaniadakis, sendo

$$\phi_{\kappa}(l) = l \exp_{\kappa} \left( -\frac{l^2}{\sigma_{\kappa}^2} \right).$$
(4.20)

#### 4.3 Conjunto de Dados

Para a análise, utilizamos um catálogo de proteínas compilado pelo National Center for Biotechnology Information (NCBI) [37]. O tamanho de uma sequência de proteína, nas bases de dados biológicos, é dada em aminoácidos. Devido as flutuações na distribuição de tamanho das proteínas, como visto na figura (4.1), decidimos estudar a distribuição acumulada, onde as flutuações podem ser suprimidas, e compará-la com a função distribuição de probabilidade no formalismo de Tsallis e Kaniadakis. Dadas por,

$$\phi_q(x) = A_q \int_0^x x \left[ 1 - (1 - q) \left( \frac{x}{\sigma_q} \right)^2 \right]^{\frac{1}{1 - q}} dx, \qquad (4.21)$$

$$\phi_{\kappa}(x) = A_{\kappa} \int_{0}^{x} x \left\{ \sqrt{1 + \left[\kappa \left(\frac{x}{\sigma_{\kappa}}\right)^{2}\right]^{2}} - \kappa \left(\frac{x}{\sigma_{\kappa}}\right)^{2} \right\}^{\frac{1}{\kappa}} dx$$
(4.22)

sendo  $A_q$  e  $A_{\kappa}$  são fatores de normalização e os desvios das distribuições são dados por,  $\sigma_q$  e  $\sigma_{\kappa}$ .



Figura 4.1: A distribuição de tamanho para as proteínas do cromossomo 01 em escala log-log.

Nos gráficos abaixo, vamos apresentar as distribuições acumuladas para todos os cromossomos. Sendo que as funções de distribuição (4.21) e (4.22) foram utilizadas para fitar o catálogo de dados das proteínas, para obter os melhores valores de  $\phi_q(x) e \phi_{\kappa}(x) e$ , consequentemente, o melhores valores para q,  $\sigma_q$ ,  $\kappa e \sigma_{\kappa}$  para cada distribuição acumulada.



Figura 4.2: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 01, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul).



Figura 4.3: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 02, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)



Figura 4.4: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 03, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)



Figura 4.5: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 04, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)



Figura 4.6: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 05, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)



Figura 4.7: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 06, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)



Figura 4.8: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 07, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)



Figura 4.9: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 08, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)



Figura 4.10: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 09, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)



Figura 4.11: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 10, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)



Figura 4.12: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 11, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)



Figura 4.13: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 12, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)



Figura 4.14: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 13, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)



Figura 4.15: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 14, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)



Figura 4.16: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 15, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)



Figura 4.17: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 16, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)



Figura 4.18: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 17, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)



Figura 4.19: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 18, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)



Figura 4.20: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 19, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)



Figura 4.21: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 20, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)



Figura 4.22: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 21, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)



Figura 4.23: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo 22, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)



Figura 4.24: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo X, o ajuste da distribuição usando o formalismo de Tsallis (linha vermelha) e o ajuste da distribuição usando o formalismo de Kaniadakis (linha azul)



Figura 4.25: A distribuição acumulada de tamanho para as proteínas do cromossomo Y. A funções de distribuição (4.21) e (4.22) não conseguiram descrever a distribuição acumulada.

A tabela (4.1) mostra todos os resultados numéricos dos parâmetros  $q, \sigma_q, \kappa \in \sigma_{\kappa}$ .

Notamos que, para a maioria dos cromossomos, a variação do parâmetros generalizados,  $q \in \kappa$ , estão limitados ao intervalo de 1.32 <  $q < 1.52 \in 0.45 < \kappa < 0.58$ . Enquanto, a variação do desvio da distribuições,  $\sigma_q \in \sigma_{\kappa}$ , estão limitados entre 296 <  $\sigma_q < 481 \in 403 < \sigma_{\kappa} < 481$ .

Cromossomo	q	$\sigma_q$	$\kappa$	$\sigma_{\kappa}$
01	$1,431841^{+0,001958}_{-0,001995}$	$373, 365838^{+1,449688}_{-1,450798}$	$0,5254419^{+0,0035673}_{-0,0035673}$	$425,7164_{-8,7486}^{+8,7485}$
02	$1,498645^{+0,002341}_{-0,002293}$	$382, 133012^{+1,925402}_{-2,063049}$	$0,5644650_{-0,0056810}^{+0,0056810}$	$403,8419^{+7,3138}_{-7,3137}$
03	$1,414109^{+0,001787}_{-0,001836}$	$435,358983^{+1,482218}_{-1,485363}$	$0,5321925^{+0,0037462}_{-0,0037462}$	$462,8009^{+5,6719}_{-5,6719}$
04	$1,367738^{+0,001811}_{-0,001770}$	$448,010012^{+1,248469}_{-1,302935}$	$0,5080098^{+0,0039865}_{-0,0039864}$	$466,2112^{+5,9668}_{-5,9668}$
05	$1,345429^{+0,002770}_{-0,002660}$	$442, 127053^{+1,778783}_{-1,915158}$	$0,4728378^{+0,0038534}_{-0,0038534}$	$468,6030^{+5,7908}_{-5,7908}$
06	$1,444947^{+0,003162}_{-0,003236}$	$352,000241^{+2,159024}_{-2,063200}$	$0,5303918^{+0,0021886}_{-0,0021886}$	$462,5969^{+5,6504}_{-5,6504}$
07	$1,329755^{+0,001942}_{-0,002112}$	$443,724449^{+1,314041}_{-1,292684}$	$0,4693235^{+0,0041744}_{-0,0041744}$	$460,3621^{+5,6949}_{-5,6948}$
08	$1,447178_{-0,002155}^{+0,002374}$	$366, 223381^{+1,565100}_{-1,693797}$	$0,5356822^{+0,0035956}_{-0,0035957}$	$459,6813^{+5,8975}_{-5,8975}$
09	$1,461986^{+0,002286}_{-0,002120}$	$402,274032^{+1,565100}_{-1,885240}$	$0,5685736^{+0,0052278}_{-0,0052279}$	$450,6073^{+5,7795}_{-5,7794}$
10	$1,437688^{+0,002928}_{-0,002867}$	$401,990246^{+2,265314}_{-2,331028}$	$0,5480032^{+0,0055972}_{-0,0055971}$	$465,0853^{+5,6707}_{-5,6706}$
11	$1,410214\substack{+0,003809\\-0,003738}$	$371, 346880^{+2,621940}_{-2,408793}$	$0,5076641^{+0,0034989}_{-0,0034989}$	$451,1584_{-5,2816}^{+5,2815}$
12	$1,404967^{+0,002594}_{-0,002515}$	$408,716798^{+1,751763}_{-1,895852}$	$0,5003023^{+0,0039409}_{-0,0039410}$	$442,9789^{+5,4948}_{-5,4948}$
13	$1,446587^{+0,005063}_{-0,004754}$	$408,021244_{-3,791446}^{+3,622246}$	$0,5449903^{+0,0040200}_{-0,0040201}$	$466,6714_{-5,3252}^{+5,3252}$
14	$1,400201\substack{+0,004656\\-0,004621}$	$389,698940^{+2,955972}_{-2,910560}$	$0,4580926^{+0,0070026}_{-0,0070026}$	$480,0390^{+5,2644}_{-5,2645}$
15	$1,445493^{+0,003650}_{-0,003542}$	$403,039086^{+2,561754}_{-2,834432}$	$0,5552805^{+0,0040755}_{-0,0040756}$	$452,8491^{+5,4338}_{-5,4339}$
16	$1,390493\substack{+0,002393\\-0,002342}$	$399,433287^{+1,571907}_{-1,581110}$	$0,4727437_{-0,0044874}^{+0,0044874}$	$473,2818_{-5,4883}^{+5,4882}$
17	$1,449660_{-0,002312}^{+0,002482}$	$360, 308640^{+1,845985}_{-1,820790}$	$0,5036319^{+0,0070213}_{-0,0070213}$	$453,8627^{+6,0321}_{-6,0320}$
18	$1,418621_{-0,002312}^{+0,002482}$	$427,068171_{-3,434756}^{+3,506963}$	$0,5721631_{-0,0054814}^{+0,0054815}$	$461,9972_{-5,3646}^{+5,3647}$
19	$1,198803^{+0,007655}_{-0,007692}$	$480,753415_{-4,022692}^{+3,957334}$	$0,3799593^{+0,0081582}_{-0,0081581}$	$474, 1698^{+5,3730}_{-5,3730}$
20	$1,408952^{+0,002835}_{-0,002790}$	$356, 345579^{+1,731004}_{-1,653344}$	$0,4620070_{-0,0047195}^{+0,0047195}$	$460, 1333_{-5,4105}^{+5,4106}$
21	$1,514883^{+0,005514}_{-0,006472}$	$296,376453^{+4,149721}_{-3,599627}$	$0,5017881^{+0,0076305}_{-0,0076306}$	$460,3932_{-5,6783}^{+5,6783}$
22	$1,370674_{-0,007765}^{+0,007539}$	$392,886858_{-4,514664}^{+4,655612}$	$0,4804931_{-0,0055423}^{+0,0055423}$	$464,3497^{+5,6053}_{-5,6053}$
X	$1,445953^{+0,002935}_{-0,002991}$	$348,776365^{+2,032333}_{-1,899724}$	$0,4948986^{+0,0043916}_{-0,0043916}$	$468,7407^{+5,5416}_{-5,5416}$
Y	_			

Tabela 4.1: Resultados numéricos para os parâmetros ajustados  $q,\,\sigma_q,\,\kappa,\,\sigma_\kappa$ 

Notamos que, para a maioria dos cromossomos, as funções de distribuição (4.21) e (4.22) conseguiram descrever a distribuição acumulada. Porém, o cromossomo Y apresentou um característica bimodal, como visto na figura 4.26, assim, notamos que as funções só conseguem descrever uma distribuição unimodal. Assim, as funções de distribuição (4.21) e (4.22) não conseguiram descrever o comportamento do cromossomo Y. Portanto, sendo necessário fazer uma combinação linear da funções distribuição para descrever a

distribuição acumulada do cromossomo Y.

$$\phi_q(x) = \phi_{q_1}(x) + \phi_{q_2}(x) \tag{4.23}$$

$$\phi_{\kappa}(x) = \phi_{\kappa_1}(x) + \phi_{\kappa_2}(x) \tag{4.24}$$



Figura 4.26: A distribuição de tamanho para as proteínas do cromossomo Y apresenta uma bimodalidade.

## Capítulo 5

# Conclusões e Perspectivas

O presente estudo apresentou duas formas de obter a função distribuição de tamanho para as proteínas sintetizadas pelo cromossomo humano. Para isso, foi necessário apresentar a distribuição Maxwelliana, que se baseia na isotropia do espaço de velocidades. Apesar da grande variedade de aplicações a Mecânica Estatística clássica não descreve os sistemas fortemente correlacionados ou que apresentem interações de longo alcance, onde podem ser descritos por uma lei de potência. Assim, apresentamos os formalismos de Tsallis [6] e Kaniadakis [5] como generalizações da estatística proposta por Boltzmann-Gibbs.

Para desenvolvermos as funções de distribuição generalizada de tamanho, iniciamos apresentando a distribuição Mawxlliana clássica. Então, generalizamos a distribuição Maxwelliana com os formalismos generalizados de Tsallis e Kaniadakis e apresentamos a distribuição de tamanho para as proteínas. Sendo que o resultado mais importante deste trabalho é que, como base na análise da distribuição de tamanho para as proteínas, as distribuições q-Maxwelliana e  $\kappa$ -Maxwelliana são funções viáveis para a descrição da distribuição das proteínas. Onde, notamos que os melhores valores de  $q \in \kappa$ , estão em torno de 1,41 e 0,51, respectivamente.

Como perspectiva, pretendemos replicar o estudo atual com um abordagem entrópica. Sendo outra possibilidade, aplicar os resultados obtidos nesses trabalho para obter melhores resultados de uma rede de interação proteína-proteína [38].

# **Referências Bibliográficas**

- 1 SHANNON, C. E. A mathematical theory of communication. Alcatel-Lucent, v.27, p.379-423, 1948.
- 2 ABE, S. A note on the q-deformation: theoretic aspect of the generalized entropies in nonextensive physics. Phys. Lett. A, v.224, 6, p. 326-330, 1997.
- 3 RENYI, A. Probability theory. North-Holland, Amsterdam, 1970.
- 4 SHARMA, B. D. & MITTAL, D. P. New nonadditive measures of entropy for discrete probability distributions. J. Math. Sci., v.10, p. 28-40, 1975.
- 5 KANIADAKIS, G. Non-linear kinetics underlying generalized statistics. Physica A, v. 296, n. 3-4, p.405-425, 2001.
- 6 TSALLIS, C. Possible generalization of Boltzmann-Gibbs Statistics. J. Stat. Phys., v. 52, n. 1-2, p.479-487, 1988.
- 7 KANIADAKIS, G. Statistical mechanics in the context of special relativity II. Physica E, v. 72, p. 036108, 2005.
- 8 KANIADAKIS, G. Statistical mechanics in the context of special relativity. Physica E, v. 66, p. 056125, 2002.
- 9 TSALLIS, C.; CIRTO, L.J.L. Black hole thermodynamical entropy Eur. Phys. J. C, 2013.
- 10 SOARES, B.B.; CARVALHO, J.C.; do NASCIMENTO Jr., J.D. & de MEDEIROS, J.R. Tsallis maximum entropy distribution function for stellar rotational velocities in the Pleiades. Physica A, p. 413-422, 2006.
- 11 CARVALHO, J. C. et al. Non-Gaussian stattistics and stellar rotational velocities of main-sequence field stars. The Astrophysical Journal Letters, v.696, n. 1, p. L48-L51, 2009.
- 12 SILVA, R.; VILAR, C. S.; FRANÇA, G. S. & ALCANIZ, J. S. Nonextensive models for earthquakes. Pysical Review, v. 73, p. 026102-1 - 026102-5, 2006.

- 13 BOGACHEV, M. I.; KAYUMOV, A. R.; BUNDE, A.; Universal internucleotide statistics in full genomes: A footprint of the DNA structure and packaging?. PLoS ONE 9(12), 2014.
- 14 PENG, C.K.; BULDYREV, S.V.; GOLDBERGER, A.L.; HAVLIN, S.; SCIORTINO, F.; SIMONS, M. Long-range correlations in nucleotide sequences Nature, 356, 168, 1992.
- 15 LI, W.; KANEKO, K. Long-range correlation and partial  $\frac{1}{f^{\alpha}}$  in a Noncoding DNA sequence Europhys. Lett., 17 (1992), 655.
- 16 VOSS, R.F., Evolution of long-range fractal correlations and  $\frac{1}{f}$  noise in DNA base sequence Phys. Rev. Lett., 68 (1992), 3805.
- 17 BUIDYREV S.V., et al., Generalized Lévy-walk model for DNA nucleotide sequences. Phys. Rev. E, 47, (1993), 4514.
- 18 MANTEGNA, R.N., et al., Systematic analysis of coding and noncoding DNA sequences using methods of statistical linguistics Phys. Rev. E, 52, (1995), 2939.
- 19 A. Arneodo, E. Bacry, P.V. Graves, J.F. Muzy, Characterizing long-range correlations in DNA sequences from wavelet analysis Phys. Rev. Lett., 74, (1995), 3293.
- 20 HAO, B.L. Fractals from genomes exact solutions of a biology-inspired problem, Physica A, 282, (2000), 225.
- 21 WATSON, J. D.; BERRY, A. DNA: o segredo da vida. Companhia das Letras, 2005.
- 22 MOREIRA, D. A. **Propriedades Termo-Eletrônicas da Molécula do DNA**.(Tese de Doutorado). UFRN, Natal, 2008.
- 23 PROVATA, A.; ALMIRANTIS, Y. Fractal cantor patterns int the sequence structure of DNA, Fractals, 8, (2000), 15.
- 24 ELSON, D.; CHARGAFF, E. On the desoxyribonucleic acid content of sea urchin gametes. Experientia, v.8, p.143-145, 1952.
- 25 SHINE, J.; DALGARNO, L. Determinant of cistron specificity in bacterial ribosomes, Nature, v.254, p.34–38, 1975.
- SOUZA, N. T. C. M.; Anselmo, D. H. A. L.; Silva, R.; VASCONCELOS, M. S.; MELLO,
  V. D. A κ-statistical analysis of the Y-chromosome. Europhysics Letters (Print),
  v. 108, p. 38004, 2014.
- 27 PEREIRA, F. I. M.; SILVA, R. ; ALCANIZ, J. S. Non-Gaussian statistics and the relativistic nuclear equation of state. Nuclear Physics A, p. 136-148, 2009.

- 28 MACEDO-FILHO, A. ; MOREIRA, D.A. ; Silva, R. ; DA SILVA, LUCIANO R. .Maximum entropy principle for Kaniadakis statistics and networks. Physics Letters. A (Print), v. 377, p. 842-846, 2013.
- 29 TSALLIS, C. Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics. Nova Iorque: Spring, 2009. 389 p.
- 30 BENTO, E. P. Entropias generalizadas: vínculos termodinâmicos da terceira lei. Tese - Programa de Pós-Graduação em Física pelo Departamento de Física Teórica e Experimental, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal. 2016.
- 31 TSALLIS, C.; Mendes, R. S.; Plastino, A. R. The role of constraints within generalized nonextensive statistics. Physica A, v. 256, n. 3-4, p.545-554, 1998.
- 32 BAGCI, G. B.; OIKONOMOU, T. Validity of the third law of thermodynamics for the Tsallis entropy. Phys. Rev. E 93, 022112, 2016.
- 33 SILVA, R. Teoria Cinética Não-Extensiva: Efeitos Físicos em Gases e Plasmas.(Tese de Doutorado). UFRN, Natal, 2000.
- 34 TSALLIS, C. Nonextensive Statistical Mechanics and Thermodynamics. Disponível em: (http://tsallis.cat.cbpf.br/biblio.htm). Acesso: Nov/2015.
- 35 SILVA, J. M.; LIMA, J. A. S.; de SOUZA, R. E.; Del Popolo, A.; Le DELLIOU, Morgan; LEE, X. Chandrasekhar's dynamical friction and non-extensive statistics. Journal of Cosmology and Astroparticle Physics, v.2016, n.05, p.21, 2016.
- 36 CARVALHO, J. C.; SILVA, R.;NASCIMENTO, J. D.; MEDEIROS, J. R. Power law statistics and stellar rotational velocities in the Pleiades. EPL, 84, (2008), 59001.
- 37 National Center for Biotechnology Information (https://www.ncbi.nlm.nih.gov/ genome/proteins/51?genome\_assembly\_id=284420&gi=568815597)
- 38 PARRISH, J. R.; YU, J.; LIU, G.; HINES, J. A.; CHAN, J. E.; MANGIOLA, B. A.; ZHANG, H.; PACIFICO, S.; FOTOUHI, F.; DIRITA, V. J.; IDEKER, T.; ANDREWS, P.; FINLEY, R. L. A proteome-wide protein interaction map for Campylobacter jejuni. Genome Biology, v.8, p.1-19, 2007.
- 39 BENTO, E. P. Fundamentação cinética da estatística não-gaussiana: Efeitos em Politrópicas. Setembro de 2011. 78 p. Dissertação - Programa de Pós-Graduação em Física pelo Departamento de Física Teórica e Experimental, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal. 2011.
- 40 SANTOS, A. P.; SILVA, R.; ALCANIZ, J. S. & ANSELMO, D. H. A. L. Non-Gaussian effects on quantum entropies. Physica A., v. 391, p.2182-2192, 2012.

- 41 GROOT, S. R.; LEEUWEN, W. A. van.& WEERT, Ch. G. van. **Relativistic Kinetic Theory**. Nova Yorque: North-Holland Publishing Company, 1980. 433 p.
- 42 SANTOS, A. P. Termoestatística Quântica: Uma abordagem via estatísticas Não-Gaussianas. (Tese de doutorado). UFRN, Natal, 2012.
- 43 WONG, C. & WIL, G. Tsallis Fits to  $p_T$  Spectra and Multiple Hard Scattering in pp Collisions at LHC. Phys. Rev. D., v.87, p.114007, 2013.
- 44 DEUTSCH, A. J. Stelar Rotation. ed. A. Slettebak, in Proc. IAU Colloq. 4. 1970.
- 45 SILVA, R. & ALCANIZ, J. S. Non-extensive statistics and the stellar polytrope index. Physica A, 341:208–214, 2004.
- 46 CALLEN, H. B. Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics. John Wiley & Sons, Philadelphia, 1985.
- 47 HUANG, K. Statistical Mechanics. John Wiley & Sons, New York, 1987.
- 48 REIFF, F. Fundamentals of Statistical and Thermal Physics. Waveland Press, Long Grove, IL, 2009.
- 49 SALINAS, S. R. A. Introdução à Física Estatística. EDUSP, São Paulo, 1999.
- 50 SILVA, R. Teoria Cinética Não-Extensiva: Efeitos Físicos em Gases e Plasmas.(Tese de Doutorado). UFRN, Natal, 2000.
- 51 SOMMERFELD, A. Thermodynamics and Statistical Mechanics: Lectures on theorical Physics. vol V, Academic Press, 1993. Cap.V, p.293-310.
- 52 LIMA, J. A. S.; BEZERRA, J. R. & SILVA, R. Conservative force fields in nonextensive kinetic theory. Physica A, v. 316, p. 289, 2002.