

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**Relaxação ao equilíbrio termodinâmico em sistemas
com interações de longo alcance***

Felipe Leite Antunes

Dissertação elaborada sob orientação do Professor Yan Levin, co-orientação do Professor Renato Pakter e apresentada ao Instituto de Física da UFRGS em preenchimento do requisito final para obtenção do título de Mestre em Física.

Porto Alegre
Agosto de 2014

* Trabalho financiado pela Comissão de Aperfeiçoamento do Ensino Superior(CAPES)

Agradecimentos

Agradeço...
aos meus professores, pelo exemplo,
aos meus amigos, pela generosidade,
ao meu coorientador, pelas sugestões,
ao meu orientador, pela confiança,
à minha mãe, pelo suporte,
ao meu tio, pelo incentivo,
à minha namorada, pela companhia,
Sem cada um de vocês, tudo seria diferente.

“Ludwig Boltzmann, who spent much of his life studying statistical mechanics, died in 1906, by his own hand. Paul Ehrenfest, carrying on the same work, died similarly in 1933. Now it is our turn to study statistical mechanics.

Perhaps it will be wise to approach the subject cautiously.”

David Goodstein, “States of Matter”

Resumo

A mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs foi desenvolvida para sistemas cujas forças são de curto alcance. Através de equações cinéticas, somos capazes obter o valor de observáveis macroscópicos no equilíbrio termodinâmico conhecendo apenas a energia do sistema. Por outro lado, ainda não existe uma teoria como a de Boltzmann-Gibbs para sistemas com interações de longo alcance, que apresentam propriedades intrigantes do ponto de vista físico, tais como um valor negativo para o calor específico no ensemble microcanônico, transições de fase fora de equilíbrio e estados quasi-estacionários, para os quais o tempo de relaxação diverge com o número de partículas.

Neste trabalho, introduzimos um modelo composto de dois subsistemas com interações de longo alcance acoplados através de um potencial de curto alcance modulado por uma constante de acoplamento e mostramos que o tempo de relaxação ao equilíbrio termodinâmico depende da intensidade desse termo. Com uma metodologia baseada em simulações de dinâmica molecular, fomos capazes de obter o expoente característico da relaxação. Nossos resultados indicam que o valor desse expoente está relacionado com a perda de integrabilidade e a presença de caos nas trajetórias das partículas sob ação do potencial do estado quasi-estacionário.

Abstract

The statistical mechanics of Boltzmann-Gibbs was developed for systems whose forces are short-ranged. Through kinetic equations we can obtain the thermodynamic equilibrium value of macroscopic observables, only knowing the energy of the system. On the other hand, we do not have yet a theory like the Boltzmann-Gibbs for systems with long-range interactions, which have intriguing properties from the physical point of view, such as a negative value for the specific heat in the microcanonical ensemble, out of equilibrium phase transitions and quasi-stationary states, for which the relaxation time diverges with the number of particles.

In this paper we introduce a model composed of two subsystems with long-range interactions coupled by a short-range potential modulated by a coupling constant and showed that the relaxation time to the thermodynamic equilibrium depends on the intensity of this term. With a methodology based on molecular dynamics simulations, we were able to obtain the characteristic exponent of relaxation. Our results indicate that the value of this exponent is related with the loss of integrability and presence of chaos in particle trajectories subjected to quasi-stationary state potential.

Sumário

1. Introdução	1
1.1 Equilíbrio termodinâmico	2
1.2 Aditividade e extensividade	2
1.3 Ergodicidade e Mixing	3
1.4 Interações de longo alcance	4
1.5 Dinâmica de Vlasov	5
1.6 Relaxação para o equilíbrio	6
2. Modelo HMF	10
2.1 O modelo	10
2.2 Equilíbrio termodinâmico	12
2.3 Fora do equilíbrio: estado quasiestacionário	14
2.4 A condição virial	18
2.5 A equação de envelope	19
2.6 O modelo de partícula teste	21
2.7 Relaxação para o equilíbrio	22
3. Modelo HMF-Ladder	25
3.1 Equilíbrio termodinâmico	26
3.2 Dinâmica Molecular	28
3.3 A condição virial	29
3.4 A equação de envelope	32
3.5 O modelo de partícula teste	35
3.6 Relaxação para o equilíbrio	40
4. Conclusões e perspectivas	46

Referências Bibliográficas 48

Capítulo 1

Introdução

Sistemas físicos são constituídos por elementos que interagem entre si. Se esta interação é de curto alcance, cada elemento é sensível somente à sua vizinhança. Diferentemente, quando a interação é de longo alcance, cada elemento interage com todos os outros componentes do sistema. Dentro desse último tipo de interação, enquadram-se interações gravitacionais [1, 2, 3], vórtices em mecânica dos fluidos em duas dimensões[4], sistemas relevantes para a física de plasmas[5] e o laser de elétrons livres (FEL¹)[6].

Tradicionalmente, a mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs é utilizada para prever o estado de equilíbrio termodinâmico de um sistema macroscópico, previsão que se baseia apenas nas leis da dinâmica molecular[7]. No entanto, se quisermos aplicar essa abordagem aos sistemas com interações de longo alcance, precisamos levar em conta duas propriedades essenciais à termodinâmica: a extensividade e a aditividade. A primeira é necessária para garantir um limite termodinâmico não trivial e a equivalência entre ensembles, a segunda para assegurar que no limite termodinâmico a energia e entropia do sistema sejam iguais à soma das energias e entropias de seus subsistemas macroscópicos. No entanto, para sistemas com interações de longo alcance a energia não é mais extensiva e as energias das interfaces entre subsistemas não são mais negligenciáveis em relação a energia do próprio sistema e, portanto, há perda da aditividade. Embora a extensividade possa ser recuperada através da prescrição de Kac [8], que consiste em escalar a energia de interação com o inverso do número de partículas, a ausência da aditividade pode nos levar a inconsistências no limite termodinâmico como, por exemplo, a inequivalência entre ensembles [9] e valores negativos para o calor específico no ensemble microcanônico [10, 11, 12].

¹ do inglês *free-electron laser*

1.1 Equilíbrio termodinâmico

O equilíbrio termodinâmico, no ensemble canônico, é caracterizado pelo mínimo da energia livre de Helmholtz $F(N,V) = U(N,V) - TS(N,V)$, onde $S(N,V)$ é a entropia do sistema, dado pela fórmula de Boltzmann $S = k_B \ln W$, onde W é o número de microestados disponíveis ao sistema e T a temperatura do reservatório térmico com qual o mesmo está em contato. Para sistemas Hamiltonianos, o volume do espaço de fases é proporcional a W , portanto $S \sim N$ independentemente do alcance das interações. Logo, para sistemas cujas interações são de curto alcance, tanto a energia quanto a entropia escalam linearmente com o número de partículas, o que leva a um limite termodinâmico não trivial. Já para sistemas com interações de longo alcance, a energia interna escala super-linearmente com o número de partículas, $U \sim N^2$, e o mínimo da energia livre de Helmholtz será dado pelo mínimo da energia interna, a menos que a temperatura do reservatório escale linearmente com o número de partículas, resultando numa termodinâmica trivial[13]. A solução para obter um limite termodinâmico bem definido nesses casos, é reescalar a energia de interação por um fator $1/N$, prescrição devida a Kac[8].

1.2 Aditividade e extensividade

Para sistemas com interações de curto alcance, a aditividade decorre de que a energia das interfaces entre seus subsistemas macroscópicos escala com o número de partículas como $N^{d-1/d}$, onde d é dimensão do espaço no qual esse está imerso, enquanto a energia do sistema escala com N . Portanto, no limite termodinâmico, a energia das interfaces é negligenciável em relação a energia do sistema e, conseqüentemente, a energia total é igual à soma das energias dos subsistemas. Em contraste, para sistemas cujas interações são de longo alcance, não podemos delimitar os subsistemas e, portanto, o conceito de interface perde seu significado. Assim sendo, há perda de aditividade e, como consequência, podemos encontrar um valor negativo para o calor específico no ensemble microcanônico e, com isso, inequilavência entre ensembles [14, 15, 10, 11, 12].

Um sistema composto por N partículas confinado em um volume V , é dito extensivo se, quando o volume e o número de partículas são escalados por λ , a energia interna $U(\lambda N, \lambda V)$ escala como $\lambda U(N, V)$. Podemos ver que essa propriedade é satisfeita por sistemas homogêneos cujas interações são limitadas: supondo um potencial de interação de alcance linear γ , o número de partículas confinado nessa região será proporcional a

$N\gamma^d/V$, onde d é a dimensão do espaço no qual o sistema está imerso. Já a energia interna será da forma $U(N,V) = Nf(N/V)$ - claramente extensiva -, onde $f(x)$ é uma função que depende de interações microscópicas entre as partículas. Potenciais do tipo $\psi(r) \sim 1/r^\alpha$ tal que $\alpha > d$, para os quais o sistema ainda é extensivo, se incluem nessa classificação. [13].

1.3 Ergodicidade e Mixing

Há ainda outro problema de grande relevância no que diz respeito à aplicabilidade da mecânica estatística de equilíbrio a sistemas com interações de longo alcance. Nos fundamentos da mecânica estatística, residem duas hipóteses equivalentes:

- A hipótese ergódica de Boltzmann[16], que permite identificar a média no ensemble microcanônico com a média assintótica no tempo, i.e., assumimos que a trajetória de um ponto numa superfície de energia constante no espaço de fases, gasta o mesmo tempo em regiões de igual probabilidade;
- A hipótese de *mixing*, devida a Gibbs[17]. Diferentemente de Boltzmann, Gibbs baseou sua interpretação na evolução de um conjunto de pontos que se dispersa como um fluido incompressível, eventualmente ocupando todo o espaço de fases. Gibbs argumentou que se o *mixing* ocorrer, o comportamento médio desse conjunto de pontos será o comportamento verificado em laboratório. Isso significa dizer que função de autocorrelação do sistema decai com o tempo.

Na prática, essas hipóteses são verificadas na maioria dos sistemas não-integráveis com interações de curto alcance, apesar de não haver nenhuma prova de sua validade. Por outro lado, para sistemas com interações de longo alcance, devido à prescrição de Kac, esperamos exatamente o oposto, pois escalar o potencial de interação com $1/N$ aniquila as correlações entre as partículas e são justamente essas que levam o sistema ao equilíbrio termodinâmico de acordo com a teoria cinética de Boltzmann.

À vista disso, no limite termodinâmico, sistemas com interações de longo alcance são compostos partículas não-colisionais governadas pela equação de Boltzmann não colisional,

também conhecida como equação de Vlasov:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{p} \cdot \nabla_{\mathbf{q}} f - \nabla_{\mathbf{q}} V[f](\mathbf{q}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f = 0 ,$$

$$V[f](\mathbf{q}, t) \equiv \int d\mathbf{q}' \int d\mathbf{p}' f(\mathbf{q}', \mathbf{p}', t) \nu(|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|) ,$$

onde $f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ é a função de distribuição de partícula única, $\nu(|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|)$ é o potencial de interação microscópico de dois corpos e $V[f](\mathbf{q}, t)$ é o potencial de campo médio.

Para N grande, porém finito, a equação de Vlasov oferece uma boa aproximação até um tempo t_{max} , cujo limite inferior é $t_{max} = O[\ln(N)]$, de acordo com o teorema de Braun e Hepp [18]. Isso significa que, para sistemas com interações de longo alcance, os limites $N \rightarrow \infty$ e $t \rightarrow \infty$ não comutam. Tomando o primeiro antes do segundo, a equação de Vlasov é sempre válida e o sistema nunca atingirá o equilíbrio termodinâmico. Com o contrário, o sistema relaxa para o estado de equilíbrio de BG.

1.4 Interações de longo alcance

Podemos caracterizar o alcance das interações através do comportamento da densidade de energia ε : se ela escala superlinearmente com o volume a densidade constante, a interação é dita de longo alcance, pois isto implica que o potencial não cai suficientemente rápido, violando a extensividade. Podemos ilustrar essa afirmação supondo um sistema homogêneo com simetria esférica, para o qual podemos escrever a densidade de energia como

$$\varepsilon = \frac{E}{V} = \Omega_{d-1} \int_{\delta}^R \rho \frac{r^{d-1} dr}{r^{\alpha}} = \frac{\Omega_{d-1} \rho}{d - \alpha} [R^{d-\alpha} - \delta^{d-\alpha}] , \quad (1.1)$$

onde δ é um *cut-off* de curta-distância, R é um *cut-off* de longa-distância, V é o volume, Ω_d é volume angular em d dimensões, ρ é a densidade de massa (ou carga). Se $\alpha > d$, $\varepsilon \rightarrow const$ quando $R \rightarrow \infty$, portanto $E \sim V$, como é típico para sistemas com interações de curto alcance. Por outro lado, se $0 \leq \alpha \leq d$, então $E \sim V^{2-\alpha/d}$, i.e, a energia escala superlinearmente com o volume. Podemos evitar essa dominância da energia em relação à entropia utilizando uma generalização apropriada da prescrição de Kac, de forma que energia livre volta a ser extensiva com o volume. Apesar da energia poder ser feita extensiva, isso não implica que o sistema seja aditivo [14].

1.5 Dinâmica de Vlasov

Simulações numéricas do modelo HMF, que será introduzido no capítulo 2, mostram um comportamento não usual, do ponto de vista da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs, da relaxação desse sistema para o equilíbrio termodinâmico. Experimentos numéricos com outros modelos mostram que essa não é uma peculiaridade do modelo HMF, mas uma propriedade geral dos sistemas com interações de longo alcance. Por exemplo, na teoria de plasmas, é conhecido que a escala de tempo da relaxação, para sistemas cuja a aproximação de Vlasov é válida, cresce com o tamanho do mesmo[13]. Em particular, o modelo de plasma unidimensional neutro exibe um tempo de relaxação que cresce com n_d^2 , onde $n_d = \rho\lambda_D$ é o número de partículas dentro de uma região cujo comprimento de onda típico é da ordem do comprimento de onda de Debye.

De acordo com Braun e Hepp [18], a dinâmica de um sistema clássico composto de N partículas interagindo através de um potencial de dois corpos de longo-alcance, suficientemente regular, concorda bem com a dinâmica de Vlasov da densidade no espaço de fase. Para um potencial do tipo em questão, a distância ² entre duas soluções inicialmente próximas da equação de Vlasov aumenta, no máximo, exponencialmente com o tempo. Ou seja, sendo f_1 e f_2 duas soluções da equação de Vlasov, o teorema de Braun-Hepp implica que

$$d(f_1(t), f_2(t)) \leq d(f_1(0), f_2(0))e^{\gamma t},$$

onde γ é uma taxa de crescimento constante. Tomando $f_1 = f_d$, a distribuição das partículas do sistema (discreta, naturalmente) e $f_2 = f_c$, a aproximação contínua de f_d , temos $d(f_1(0), f_2(0)) \rightarrow 0$ conforme N cresce ³ e, conseqüentemente, a dinâmica Hamiltoniana e a de Vlasov concordam quando $N \rightarrow \infty$. No entanto, para valores de N finitos, existe um tempo típico $\tau \sim \gamma^{-1}$ para o qual as duas dinâmicas divergem.

A partir dessa análise, pode-se concluir que as duas evoluções concordam durante um tempo que diverge como $\ln N$, se $d(f_d(0), f_c(0)) \sim 1/N$ e γ não depende de N [19]. Essa propriedade leva a estados de longa duração, chamados de estados quasi-estacionários(QSS ⁴), caracterizados por uma distribuição *coarse-grained* $\bar{f}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$, que está relacionada ao

² Medida na métrica de Wasserstein, definida no espaço de todas as medidas.

³ Tipicamente, para a aproximação contínua de sistema de muitas partículas, o erro em $t = 0$ é de ordem $1/\sqrt{N}$.

⁴ Do inglês *quasi-stationary state*.

aumento da entropia devido à filamentação da distribuição $f(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ inicial (*fine-grained*) que, por outro lado, permanece em evolução.

1.6 Relaxação para o equilíbrio

A relaxação é o processo mais fundamental no que diz respeito à evolução dos sistemas de N -corpos. Como já mencionado, a mecânica estatística usual é baseada na hipótese de ergodicidade, que é considerada estabelecida após o processo de relaxação. No entanto, muitos sistemas experimentam um processo de relaxação muito mais rico, com escalas de tempo variáveis e passando por estados estacionários com distribuições ainda não previsíveis. Esse complexo processo de relaxação vem sendo abordado na literatura por pelo menos 50 anos [20, 13, 19, 21, 22, 23].

Para sistemas com interações de longo alcance, esse processo é caracterizado genericamente por dois estágios: o primeiro, chamado de relaxação violenta, no qual o sistema parte da sua condição inicial, que não é necessariamente um estado estável do ponto de vista da equação de Vlasov, em direção a um estado que é estável nesse sentido. Esse processo é rápido, caracterizado por uma escala de tempo curta e independente do número de partículas. O segundo estágio é chamado de relaxação colisional, onde colisões residuais, devido ao número finito de partículas, fazem com que a descrição de Vlasov não seja mais válida. Essa etapa possui uma escala de tempo fortemente dependente em N , em geral na forma de uma lei de potência N^δ . Estes dois estágios são ilustrados na figura (1.1)[24].

Do ponto de vista matemático, o primeiro estágio é descrito pela equação de Vlasov, satisfeita pela função de distribuição de uma partícula no limite $N \rightarrow \infty$. No segundo estágio, devido às colisões residuais, termos de ordem $1/N$ das funções de correlação de dois corpos na hierarquia BBGKY precisam ser levados em conta, o que resulta numa escala de tempo proporcional a N [25, 21]. Para sistemas homogêneos, os termos de ordem $1/N$ são nulos, assim, conjectura-se que o termo colisional relevante passe a ser o de ordem $1/N^2$ e, apesar de não haver uma equação cinética para essa ordem, espera-se que o tempo de relaxação escale proporcionalmente a N^2 [21].

Muitos estudos apontavam uma escala de tempo não trivial, com expoente $\delta = 1.7$ [19, 24]. No entanto, simulações feitas utilizando unidades de processamento gráfico (GPUs), que possibilitam simulações com um número muito maior de partículas, apontam que $t_\times \sim N^2$ [21].

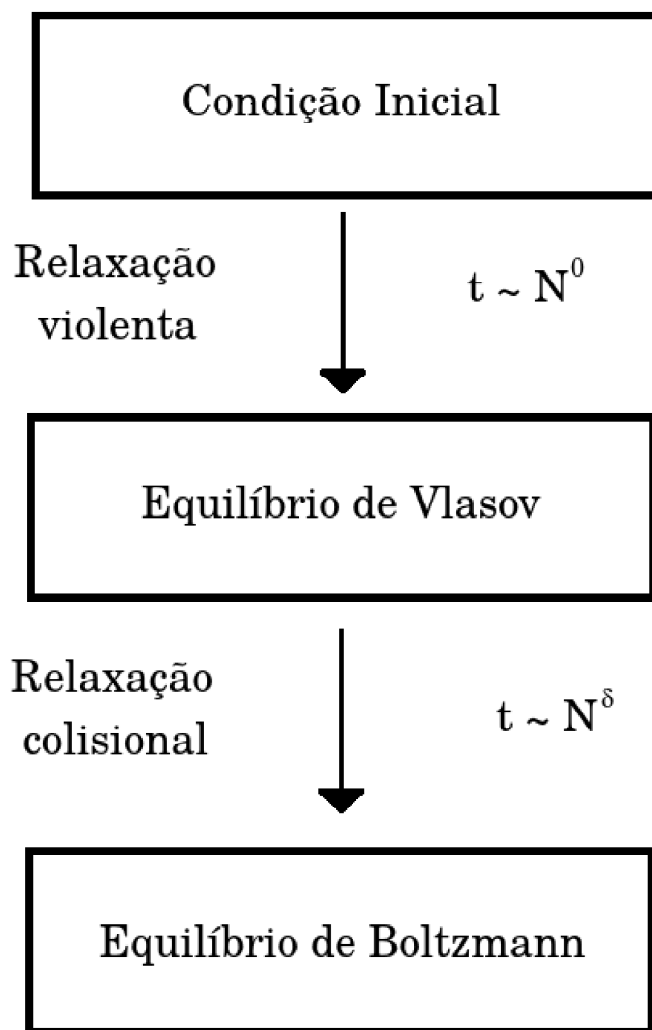


Fig. 1.1: Diagrama da evolução temporal de um sistema com interações de longo alcance. O primeiro estágio é o de relaxação violenta, cuja escala de tempo independe do número de partículas. O segundo estágio é caracterizado por colisões devido a efeitos de discretização e tem uma escala de tempo que depende de N como $t \sim N^\delta$, onde δ é um expoente característico do sistema.

Tendo em vista a complexidade da relaxação dos sistemas com interações de longo alcance, propomos um modelo com interações mistas cujo hamiltoniano leva a equações

de movimento não integráveis. Esperamos que, para um potencial desse tipo, algumas trajetórias sejam caóticas e que essa propriedade leve o sistema mais rapidamente ao equilíbrio de Boltzmann-Gibbs.

Vamos dar suporte a esse cenário no decorrer desta dissertação, que está organizada da seguinte maneira: no capítulo 2 revisaremos o modelo Hamiltoniano de Campo Médio (HMF), apresentando suas principais propriedades de relaxação, em especial introduziremos as técnicas utilizadas no capítulo 3, no qual introduziremos o modelo HMF-Ladder e suas propriedades dinâmicas. Em especial, vamos utilizar estados iniciais não-homogêneos e explorar o comportamento do expoente característico de relaxação, δ , ao aumentarmos a intensidade do termo de curto alcance.

Capítulo 2

Modelo HMF

O modelo HMF (*Hamiltonian mean field*) foi proposto, na sua forma com tempo discreto, por Konishi e Kaneko em 1992 [26] e sua forma atual, como a versão de campo médio do modelo XY onde todos os spins interagem entre si, por Antoni e Ruffo em 1995 [27]. Esse modelo tornou-se um protótipo, pois, apesar de sua simplicidade, ele é uma sonda para o estudo de sistemas gravitacionais 1D [28] e plamas unidimensionais [29], além de possuir certa similaridade com o modelo de Colson-Bonifacio para o laser de elétrons-livres [6].

2.1 O modelo

Vamos considerar o modelo Hamiltoniano de Campo Médio (HMF), representado pelo seguinte hamiltoniano

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{\gamma}{2N} \sum_{i,j=1}^N [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)], \quad (2.1)$$

onde (θ_i, p_i) são variáveis canonicamente conjugadas, com $\theta_i \in [-\pi, \pi)$. Esse hamiltoniano pode ser visualizado como uma rede unidimensional com condições de contorno periódicas $\theta_{i+N} = \theta_i$, cujos sítios são ocupados por N rotores-XY clássicos que interagem através um acoplamento ferromagnético (se $\gamma > 0$) ou antiferromagnético (se $\gamma < 0$). Também podemos, alternativamente, interpretá-lo como N partículas confinadas a moverem-se em um anel de raio unitário, interagindo via um potencial cossenoidal de alcance infinito atrativo (se $\gamma > 0$) ou repulsivo (se $\gamma < 0$), onde o módulo de γ determina a intensidade da interação[30].

O modelo HMF (2.1) também representa o primeiro modo da expansão de Fourier do potencial gravitacional unidimensional com condições de contorno periódicas. Para escla-

recer essa característica, consideremos um sistema formado por N partículas distribuídas sobre um anel de raio unitário, i.e., com posição $x \in [-\pi, \pi)$. Nesse caso a equação de Poisson é

$$\nabla^2 \psi(x) = \xi \sum_{i=1}^N \left[\delta(x - x_i) - \frac{1}{2\pi} \right]$$

onde $\xi = 4\pi Gm$, G é a constante gravitacional, $m = M/N$ é a densidade de massa e M a massa total. Expressando a delta de Dirac na base de Fourier, $\delta(x - x_i) = \sum_n \exp[in(x - x_i)]/2\pi$ e integrando a equação, temos

$$\psi(x) = \xi \left[1 - \sum_{i=1}^N \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\pi n^2} \cos(n(x - x_i)) \right].$$

A constante ξ foi somada para que o potencial seja nulo quando $x = x_i$, $\forall x_i$. Considerando termos até $n = 1$ e tomando $\gamma/N = \xi/\pi$, obtemos potencial do modelo HMF.

No presente trabalho iremos considerar o caso ferromagnético, tal que $\gamma = 1$. Assim, podemos escrever o hamiltoniano (Eq. (2.1) da seguinte maneira:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^N (1 - \cos \theta_i \cos \theta_j - \text{sen } \theta_i \text{sen } \theta_j) \quad (2.2)$$

ou,

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2} - \frac{1}{2N} \left(\sum_{i=1}^N \cos \theta_i \right)^2 - \frac{1}{2N} \left(\sum_{i=1}^N \text{sen } \theta_i \right)^2. \quad (2.3)$$

A magnetização, $\mathbf{M} = (M_x, M_y)$, onde

$$M_x = \langle \cos \theta \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \cos \theta_i \quad (2.4)$$

e

$$M_y = \langle \text{sen } \theta \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \text{sen } \theta_i, \quad (2.5)$$

é o principal observável que caracteriza a dinâmica e o estado termodinâmico do sistema[19].

Podemos escrever as equações de movimento canônicas como

$$\ddot{\theta} = -M_x \text{sen}(\theta) + M_y \cos(\theta), \quad (2.6)$$

dessa forma, segue que a energia por partícula, $\varepsilon = H/N$, é dada pela expressão

$$\varepsilon = \frac{\langle p^2 \rangle}{2} + \frac{1 - M_x^2 - M_y^2}{2}, \quad (2.7)$$

e a energia da i -ésima partícula dada por

$$u(\theta_i, p_i) = \frac{p_i^2}{2} + 1 - M_x \cos(\theta_i) - M_y \sin(\theta_i), \quad (2.8)$$

que corresponde a energia de um pêndulo. Ainda, salienta-se, que se a distribuição inicial é isotrópica, no limite termodinâmico, $M_y = 0$, assim como ao longo da evolução [31], resultado que utilizaremos ao longo do texto.

2.2 Equilíbrio termodinâmico

Vamos verificar as previsões para o equilíbrio termodinâmico desse modelo utilizando o ensemble canônico. Apesar de já conhecida[14], a descrição nesse ensemble será detalhada nesta seção, pois faremos exercício análogo no próximo capítulo, quando obtivermos as previsões de equilíbrio para o modelo HMF-Ladder.

Para obter uma expressão analítica para a função de partição do modelo HMF, faremos uso da transformação de Hubbard-Stratonovich

$$e^{bm^2} = \sqrt{\frac{b}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{(-bx^2 + 2mbx)}, \quad (2.9)$$

de forma que podemos escrever¹,

$$\begin{aligned} Z &= \int d\boldsymbol{\theta} d\mathbf{p} e^{-\frac{\beta}{2} \sum_{i=1}^N p_i^2 - \frac{N\beta}{2} (1 - M^2)} \\ &= \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{N/2} e^{-\frac{N\beta}{2}} \int_{-\pi}^{\pi} d\boldsymbol{\theta} e^{\frac{N\beta}{2} M^2} \\ &= e^{-N\beta} \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{N/2} \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} d\boldsymbol{\theta} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{N\beta}{2} x^2 + N\beta M}, \end{aligned}$$

ou, de maneira sintética,

$$Z = e^{-N\beta} \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^N J,$$

¹ Neste trabalho utilizaremos a notação abreviada $d\mathbf{q}$, que denota $d\prod_{i=1}^N q_i$.

onde

$$\begin{aligned}
 J &= \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} d\boldsymbol{\theta} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-N\beta\frac{x^2}{2} + \beta\sum_{i=1}^N \cos\theta_i x} \\
 &= \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-N\beta\frac{x^2}{2}} \int_{-\pi}^{\pi} d\boldsymbol{\theta} \prod_{i=1}^N e^{\beta\cos\theta_i x} \\
 &= \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-N\beta\frac{x^2}{2}} \left[\int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{\beta\cos\theta x} \right]^N \\
 &= \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-N\beta\frac{x^2}{2}} [I_0(\beta x)]^N,
 \end{aligned}$$

onde

$$I_0(\beta x) = \left[\int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{\beta\cos\theta x} \right]^N \quad (2.10)$$

é a função de Bessel modificada de ordem 0. Podemos re-escrever J da seguinte maneira

$$J = \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-N\left[\beta\frac{x^2}{2} - \ln I_0(\beta x)\right]},$$

de forma que, no limite termodinâmico, a energia livre de Helmholtz reescalada é

$$f \sim \inf \left[\left(\frac{x^2}{2} \right) - \frac{1}{\beta} \ln I_0(\beta x) \right].$$

Esse problema de extremo pode ser resolvido minimizando f em relação ao parâmetro x , o que resulta em

$$\beta x^* = \frac{1}{I_0(\beta x^*)} \frac{\partial I_0(\beta x)}{\partial x} \Big|_{x=x^*},$$

de onde obtemos a equação autoconsistente

$$x^* = \frac{I_1(\beta x^*)}{I_0(\beta x^*)}, \quad (2.11)$$

onde $I_0(z)$ é a função de Bessel de primeira espécie.

A equação (2.11) pode ser resolvida graficamente tendo em vista que, para z real > 0 , a função $\frac{I_1(z)}{I_0(z)}$ é positiva, monotonicamente crescente e possui derivada segunda negativa [32].

A Fig. (2.1) mostra a solução para dois valores distintos de β . Para $\beta \leq 2$, a solução é dada por $x = x^* = 0$, enquanto que, para $\beta \geq 2$, a solução cresce monotonicamente

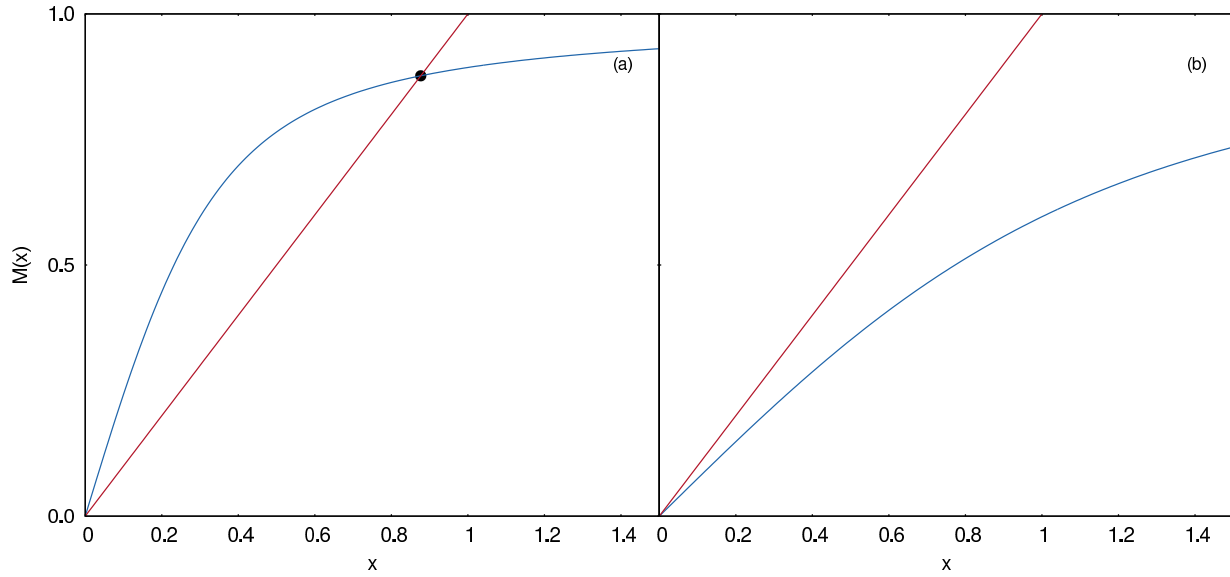


Fig. 2.1: Solução gráfica da Eq. (2.11) para dois valores distintos de β , acima e abaixo do valor crítico $\beta = 2$. A linha azul é a razão que aparece no lado direito da equação (2.11), enquanto a linha vermelha é a bissetriz. (a) $\beta=5$: a solução de equilíbrio é $m^* \neq 0$; (b) $\beta = 1.5$: a única solução de equilíbrio é $m^* = 0$.

com β , aproximando-se de $x^* = 1$ para $\beta \rightarrow \infty$. Assim, identificamos os extremos com a magnetização do sistema

$$x^* = M .$$

É importante deixar claro que valores de x diferentes dos extremos, não estão relacionados com a magnetização em estados diferentes do estado de equilíbrio[14].

2.3 Fora do equilíbrio: estado quasiestacionário

Os resultados da seção anterior são válidos somente após transcorrido um tempo de relaxação τ_x , que diverge com o número de partículas do sistema . Durante esse tempo, o sistema fica aprisionado num qSS [19]. Tais estados podem ser analisados utilizando simulações de dinâmica molecular, dado que seu longo tempo de vida permite que possamos realizar médias temporais e obter quantidades macroscópicas.

A simulação do sistema com N partículas foi feita levando em conta a simetria do sistema no espaço de fases: para cada i -ésima partícula na posição θ_i com momento p_i , existe outra na tal que $\theta_{i+N/2} = -\theta_i$ e $p_{i+N/2} = -p_i$. Isso garante que $M_y(t) = 0$ durante

toda a simulação e diminui pela metade o número de integrações, melhorando a performance da simulação. Inicializamos o sistema com partículas distribuídas de acordo com a distribuição *waterbag* de um nível,

$$f_0(\theta, p) = \eta \Theta(|\theta| - \theta_m) \Theta(|p| - p_m) , \quad (2.12)$$

onde $\Theta(x)$ é a função de Heaviside. A densidade η e os valores máximos de θ , θ_m , e de p , p_m , são obtidos através da condição de normalização da distribuição, da magnetização inicial M_0 e da energia média ε , respectivamente

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \int_{-\infty}^{\infty} dp f_0(\theta, p) , \\ M_0 &= \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \int_{-\infty}^{\infty} dp f_0(\theta, p) \cos(\theta) , \\ \varepsilon &= \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \int_{-\infty}^{\infty} dp f_0(\theta, p) \frac{p^2}{2} + \frac{1 - M_0^2}{2} . \end{aligned}$$

De onde obtemos

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{1}{4\theta_m p_m} , \\ M_0 &= \frac{\text{sen}(\theta_m)}{\theta_m} , \\ p_m &= \sqrt{3(2u - 1 + M_0^2)} . \end{aligned}$$

Implementamos a integração numérica usando o algoritmo simplético de 4ª ordem Forest-Ruth - PEFRL (Position-Extended-Forest-Ruth-Like) [33].

Com isso, verificamos que o qSS, diferentemente do estado de equilíbrio termodinâmico, depende tanto da magnetização inicial M_0 , quanto da energia u : a Fig. 2.2 mostra estados finais distintos para a mesma energia $u = 0.62$ e valores distintos para M_0 . Para $M_0 = 0.2$ o sistema rapidamente relaxa para um estado paramagnético. Em contraste, para $M_0 = 0.8$ o sistema permanece ferromagnético. A Fig. 2.3 apresenta uma comparação entre os espaços de fase iniciais, (ambos do tipo *waterbag* com mesmo θ_m), para $N = 10^5$ partículas, com energias (a) $u = 0.7$ e (c) $u = 0.45$. Os qSS finais são distintos: o sistema com energia mais alta leva a uma configuração paramagnética, enquanto o outro permanece magnetizado.

A diferença entre esses dois estados é que, dentro da fase ferromagnética, as partículas sofrem ação de um potencial de campo médio finito produzido por $M(t)$, enquanto que na

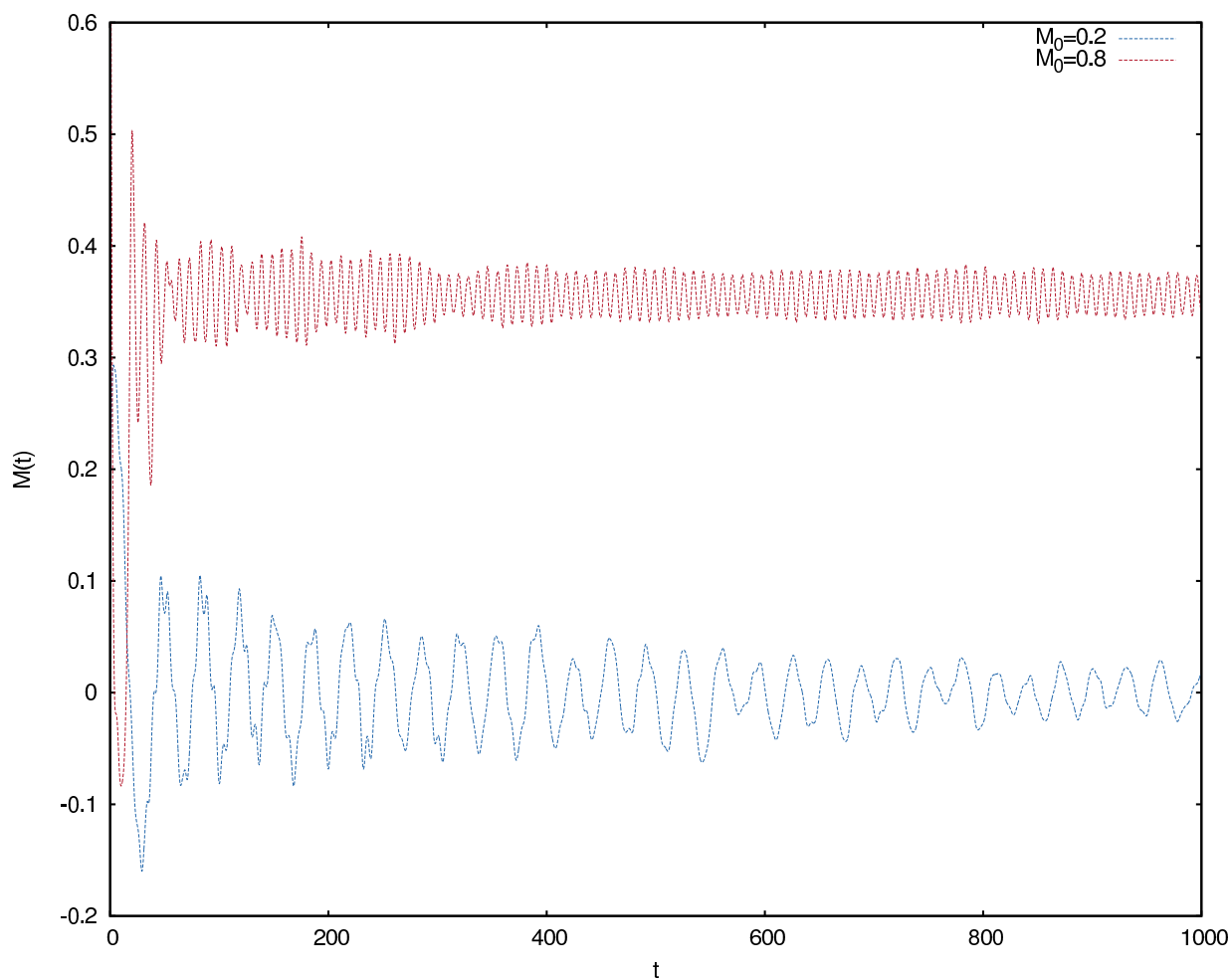


Fig. 2.2: Magnetização como função do tempo obtida usando dinâmica molecular com $N = 10^6$ e mesma energia $u = 0.62$. O estado do qSS depende da magnetização inicial: para $M_0 = 0.2$ é paramagnético; para $M_0 = 0.8$ é ferromagnético.

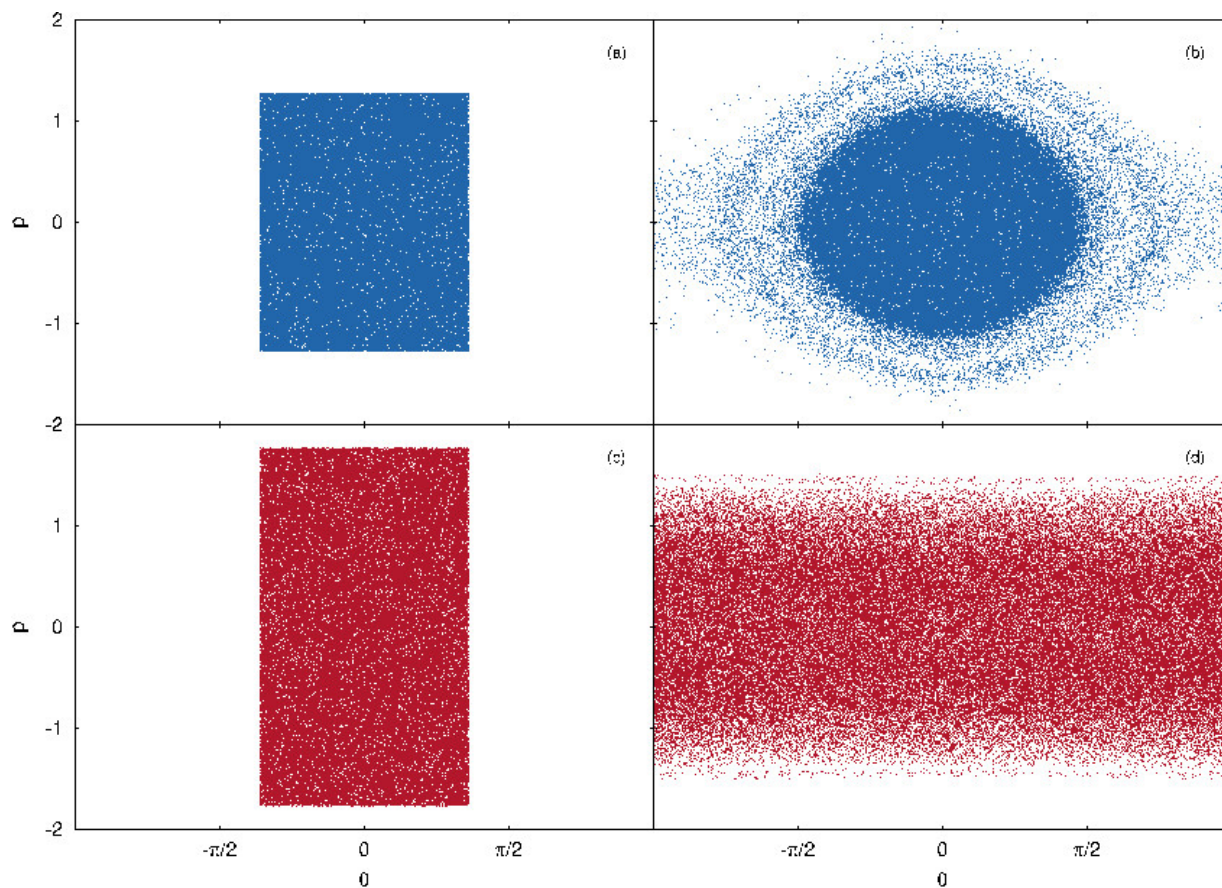


Fig. 2.3: Espaço de fases obtido via dinâmica molecular com $N = 10^5$ partículas durante um tempo de simulação de $t = 5000\tau_D$. A coluna da esquerda mostra as distribuições iniciais com (a) $u = 0.45$ e (c) $u = 0.7$. A magnetização inicial é a mesma em ambos casos, $M_0 = 0.8$. A coluna da direita mostra os dois qSS finais, (b) ferromagnético e (d) paramagnético, para os quais o sistema relaxa.

fase paramagnética o potencial médio é nulo. Isso significa que, dentro da fase ferromagnética algumas partículas podem entrar em ressonância com as oscilações do potencial e ganhar energia ao custo do movimento coletivo. Esse processo resulta no amortecimento de Landau da magnetização e leva à relaxação para o qSS. Na fase paramagnética, $M(t)$ oscila em torno de zero e não há nenhum mecanismo que amortença as oscilações[13].

2.4 A condição virial

Podemos diminuir as oscilações de densidade, que afetam distribuições iniciais que não são soluções estacionárias da equação de Vlasov durante o processo de relaxação, utilizando uma configuração que minimiza o desbalanço entre energia cinética e potencial, que leva a essas flutuações. Esse tipo de configuração é conhecida como condição virial.

Apesar do potencial presente no modelo HMF não ser uma função homogênea das coordenadas, o que implica que não podemos encontrar uma relação entre as médias da energia cinética e potencial, podemos determinar a Condição Virial Generalizada através de uma equação funcional que depende da função de distribuição de partícula-única[34].

Em um estado estacionário, o virial $G = \langle \mathbf{p} \cdot \mathbf{q} \rangle$ não depende do tempo, portanto

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{p} \cdot \mathbf{q} \rangle = \left\langle \frac{d}{dt} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{q}) \right\rangle = 0, \quad (2.13)$$

ou

$$\langle p^2 \rangle = - \langle \mathbf{q} \cdot \ddot{\mathbf{q}} \rangle. \quad (2.14)$$

Considerando que a média temporal é equivalente à média sobre as partículas e fazendo uso das equações de Hamilton, podemos escrever

$$\langle p^2 \rangle = - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{q}_i. \quad (2.15)$$

No caso de interações de longo alcance, no limite termodinâmico o campo médio é exato e o teorema do virial se reduz a

$$\langle p^2 \rangle = - \int d\mathbf{q} d\mathbf{p} f(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \left[- \frac{\partial V(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} \cdot \mathbf{q} \right], \quad (2.16)$$

onde $V(\mathbf{q})$ é o potencial de campo médio. Para o modelo HMF, com uma distribuição

inicial do tipo *waterbag*, temos

$$\langle p^2 \rangle = - \int dp d\theta f(\theta, p) [-M \text{sen}(\theta)\theta] \quad (2.17)$$

$$= \eta \int dp d\theta \Theta(|\theta| - \theta_m) \Theta(|p| - p_m) [M \text{sen}(\theta)\theta] \quad (2.18)$$

$$= \frac{1}{2\theta_m} M \int_{-\theta_m}^{\theta_m} d\theta \text{sen}(\theta)\theta \quad (2.19)$$

$$= M \frac{\text{sen}(\theta_m)}{\theta_m} - M \cos(\theta_m), \quad (2.20)$$

ou ainda, tendo em vista que $M = \frac{\text{sen}(\theta_m)}{\theta_m}$,

$$\langle p^2 \rangle = M^2 - M \cos(\theta_m). \quad (2.21)$$

Utilizando a Eq.(2.7), com $M_y = 0$, obtemos a Condição Virial Generalizada para esse modelo [13]

$$2\varepsilon - 1 + M \cos(\theta_m) = 0. \quad (2.22)$$

O teorema do virial estabelece uma condição estacionária estável para um sistema de partículas interagentes. Para um sistema isolado, com condições iniciais arbitrárias, suas energias cinética e potencial irão oscilar em torno da condição virial, progressivamente aproximando-se dela conforme o sistema torna-se estacionário. Quanto mais próximo da condição do virial, menor é a amplitude das oscilações do potencial de campo médio.

Por outro lado, se a distribuição inicial não satisfaz a condição virial, o potencial de campo médio sofrerá oscilações violentas. Algumas partículas podem entrar em ressonância com as oscilações macroscópicas e ganhar grandes quantidades de energia, então populando regiões do espaço de fase que são altamente improváveis da perspectiva da estatística de Boltzmann-Gibbs, formando um halo tênue. A evaporação das partículas, produzida pelas ressonâncias, retira energia do movimento coletivo, levando ao amortecimento de Landau [35, 36, 37] das oscilações macroscópicas do potencial de campo médio. Se as oscilações morrem completamente, o potencial de campo médio torna-se estático e a dinâmica de cada partícula torna-se integrável [13].

2.5 A equação de envelope

Uma maneira alternativa de obter a Condição Virial Generalizada, é exigir que as oscilações de densidade na distribuição inicial sejam nulas. Podemos fazer isso definindo o

envelope da distribuição como

$$\theta_e(t) = \sqrt{3 \langle \theta^2(t) \rangle}, \quad (2.23)$$

tal que, para $t = 0$, θ_e coincide com θ_m [13]. A dinâmica de θ_e é governada por

$$\ddot{\theta}_e = \frac{3 \langle \dot{\theta}^2(t) \rangle}{\theta_e(t)} + \frac{3 \langle \theta(t) \ddot{\theta}(t) \rangle}{\theta_e(t)} - \frac{9 \langle \theta(t) \dot{\theta}(t) \rangle^2}{\theta_e(t)^3}. \quad (2.24)$$

Essa equação pode ser escrita em termos da energia e da magnetização. Da conservação da energia, temos que $\langle \dot{\theta}^2(t) \rangle = 2u - 1 + M^2(t)$. Para calcular as outras médias assumimos que a distribuição em θ é uniforme no intervalo $[-\theta_e(t), \theta_e(t)]$ e nula fora dele, de forma que

$$\begin{aligned} \langle \theta(t) \ddot{\theta}(t) \rangle &= \frac{-M(t)}{2\theta_e(t)} \int_{-\theta_e}^{\theta_e} \theta \operatorname{sen}(\theta) d\theta \\ &= \frac{M(t)}{2\theta_e(t)} [2\theta_e(t) \cos(\theta_e(t)) - 2 \operatorname{sen}(\theta_e(t))] \\ &= M(t) \cos(\theta_e) - M(t) \frac{\operatorname{sen}(\theta_e(t))}{\theta_e(t)}. \end{aligned}$$

Portanto, a Eq. (2.24) pode ser escrita como

$$\ddot{\theta}_e(t) = \frac{3}{\theta_e(t)} (2\varepsilon + M_e(t) \cos(\theta_e) - 1), \quad (2.25)$$

onde usamos que

$$M_e(t) = \frac{1}{2\theta_e(t)} \int_{\theta_e(t)}^{\theta_e(t)} \cos(\theta) d\theta \quad (2.26)$$

$$= \frac{\operatorname{sen}(\theta_e)}{\theta_e(t)}, \quad (2.27)$$

e desprezamos correlações entre θ e p , de forma que $\langle \theta \dot{\theta} \rangle \approx 0$.

A Condição Virial Generalizada corresponde à condição inicial para a qual não há oscilações no envelope, sendo assim $\theta_e(t) = \theta_m$ durante toda a evolução. Isso acontece quando $\ddot{\theta}_e = 0$, ou

$$2\varepsilon + M_0 \cos(\theta_e) - 1 = 0, \quad (2.28)$$

o que está acordo com a Eq. (2.21), obtida através do teorema virial. A Fig. (2.4) exibe o comportamento da magnetização inicialmente virializada de acordo com a Eq. (2.28) para diferentes valores de energia. Com o aumento da energia, a aproximação virial concorda progressivamente menos a com dinâmica molecular.

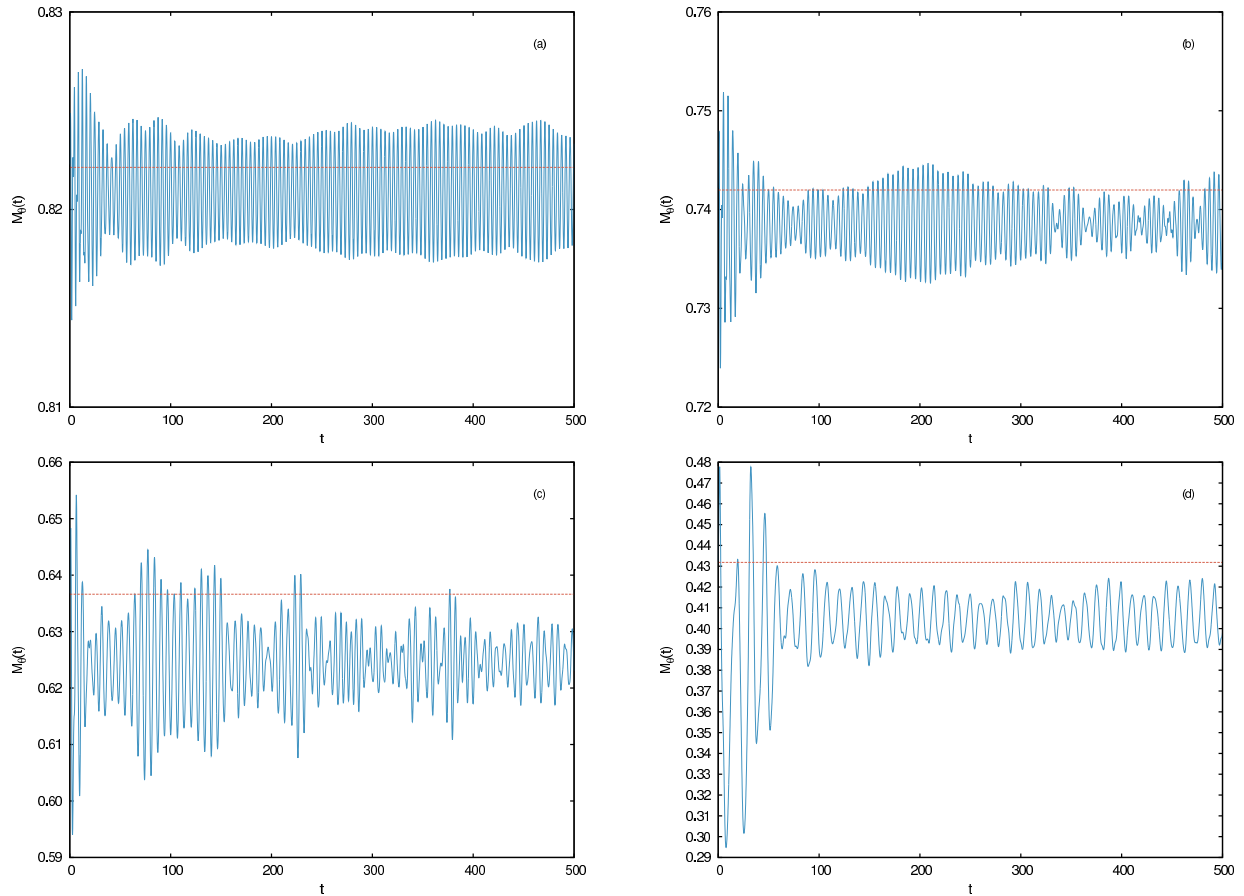


Fig. 2.4: *Evolução da magnetização ao longo do tempo para $\varepsilon = 0.3$ (a), $\varepsilon = 0.4$ (b), $\varepsilon = 0.5$ (c) e $\varepsilon = 0.6$ (d). Quanto maior a energia, mais afastada da magnetização virial (linha vermelha) é a magnetização do qSS.*

2.6 O modelo de partícula teste

A dinâmica do modelo de partícula teste é governado pela Eq. (2.21), com a magnetização dada pela equação de envelope, Eq.(2.26). A figura (2.5) mostra um mapa estroboscópico com seções do espaço de fase tomadas quando $\dot{M}_e = 0$ de 500 partículas testes distribuídas de acordo com a equação (2.12), para $\varepsilon = 0.3$ e 0.6 , respectivamente. Partículas com energias mais baixas, possuem órbitas regulares, características dos sistemas integráveis. Com $\varepsilon = 0.6$, temos uma separatriz que indica a divisão do sistema em dois comportamentos distintos: as órbitas das partículas mais energéticas (de cor azul) deixam de ser periódicas.

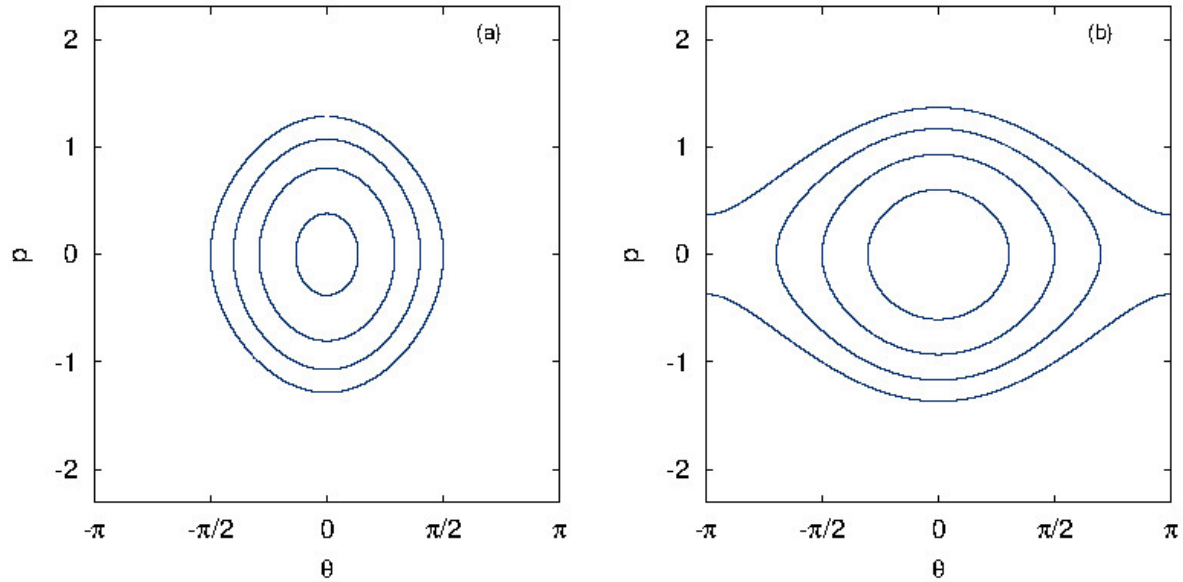


Fig. 2.5: Seções de Poincaré da dinâmica de partícula teste para $\varepsilon = 0.3$ (a) e $\varepsilon = 0.6$ (b). A dinâmica é integrável tanto em (a), quanto em (b) onde há uma separação entre um regime periódico (oscilação) e um não periódico (rotação).

2.7 Relaxação para o equilíbrio

Para verificar a lei de escala do tempo de relaxação para sistemas inhomogêneos, realizados de acordo com a Eq. (2.28), realizamos simulações computacionais com $N = 3 \times 10^4, 4 \times 10^4, 5 \times 10^4$ e 60000 partículas. O parâmetro observado foi o Kurtosis da distribuição de velocidades ², definido como

$$\kappa = \frac{\langle p^4 \rangle}{\langle p^2 \rangle^2}. \quad (2.29)$$

Para distribuições Gaussianas, $\kappa = 3$, como podemos ver na Fig. (2.6), que apresenta a distribuição de velocidades obtidas através da dinâmica molecular quando o equilíbrio é atingido. Ao reescalarmos a escala de tempo como $\tau_x = t/N^{1.0}$, podemos ver na Fig. (2.7) que as curvas colapsam. Esse expoente, $\delta = 1.0$, está de acordo com o esperado para sistema inhomogêneos [25, 21].

² Devido às oscilações do Kurtosis ao longo do tempo, os dados foram tratados utilizando médias móveis exponencialmente ponderadas[38, 39].

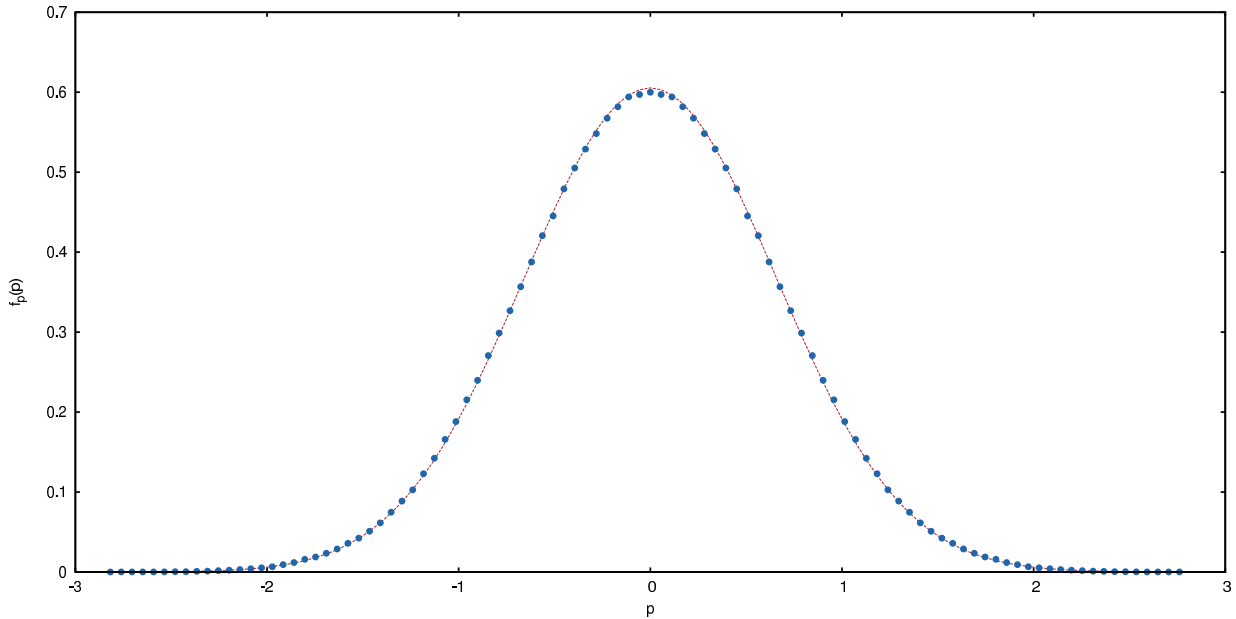


Fig. 2.6: *Distribuições de velocidade no equilíbrio para um sistema onde $\varepsilon = 0.6$ e $M_0 = 0.43$ no tempo $t = 1.35 \times 10^7 \tau_D$, quando $\kappa \simeq 3$, obtidas através da dinâmica molecular com $N=60000$ (pontos). A linha sólida é a distribuição prevista pela estatística de Boltzmann-Gibbs.*

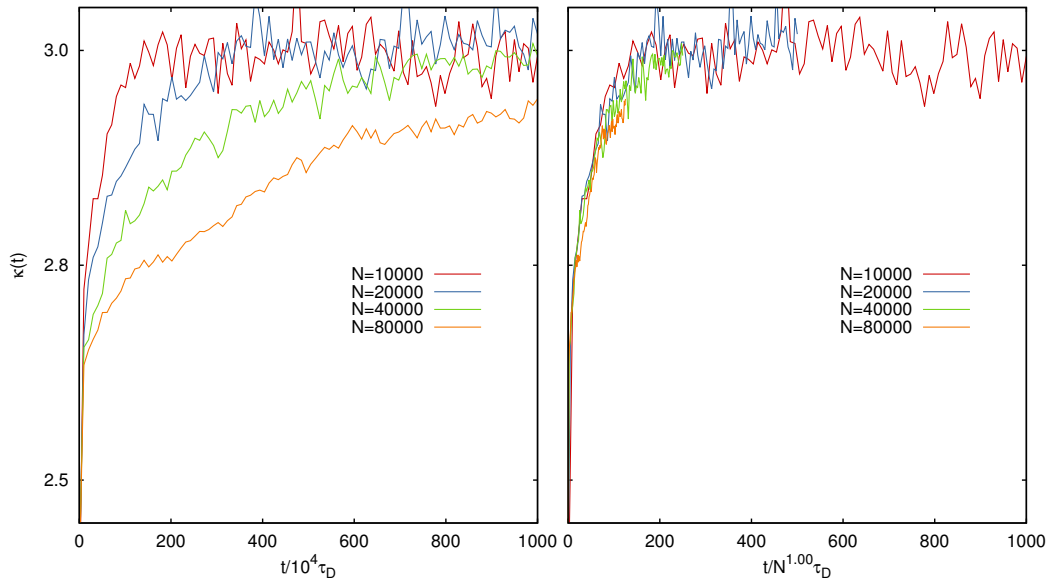


Fig. 2.7: *Relaxação para o equilíbrio, caracterizada pelo Kurutosis, Eq. (2.29), com o tempo reescalado por $3 \times 10^4 \tau_D$ em (a) e por $\tau_x = \tau_D N^{1.0}$ em (b). Neste caso a energia é $\varepsilon = 0.6$ e a magnetização inicial vale 0.43.*

Capítulo 3

Modelo HMF-Ladder

No capítulo anterior, vimos que a dinâmica no qSS do modelo HMF é integrável. Neste capítulo, iremos verificar se uma possível dinâmica caótica nesse tipo estado pode influenciar o tempo de relaxação ao equilíbrio termodinâmico. Por esse motivo nós precisamos estudar um modelo Hamiltoniano com pelo menos dois graus de liberdade. Sendo assim vamos introduzir o modelo HMF-Ladder, que é composto por dois modelos HMFs acoplados através de um potencial de curto alcance, cuja forma é $\epsilon \cos(\theta_i - \phi_i)$, onde $\theta_i \in [-\pi, \pi)$ é o ângulo da i -ésima partícula no primeiro, $\phi_i \in [-\pi, \pi)$ é o ângulo da i -ésima partícula no sistema vizinho e $\epsilon \geq 0$ é o parâmetro que fornece a intensidade do acoplamento. Para $\epsilon = 0$ recuperamos as propriedades do modelo HMF, discutidas anteriormente.

O hamiltoniano para esse modelo é dado por

$$\begin{aligned} H = & \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} (p_{\theta_i}^2 + p_{\phi_i}^2) + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^N [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)] + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^N [1 - \cos(\phi_i - \phi_j)] \\ & + \epsilon \sum_{i=1}^N \cos(\theta_i - \phi_i) . \end{aligned} \quad (3.1)$$

Podemos identificar os termos

$$\begin{aligned} H_{\theta} &= \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} p_{\theta_i}^2 + \frac{N}{2} (1 - M_{\theta}^2) , \\ H_{\phi} &= \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} p_{\phi_i}^2 + \frac{N}{2} (1 - M_{\phi}^2) , \end{aligned}$$

onde

$$M_{\theta} = \langle \cos \theta \rangle \quad (3.2)$$

e

$$M_\phi = \langle \cos \phi \rangle , \quad (3.3)$$

como hamiltonianos do tipo HMF. Dessa forma podemos re-escrever o hamiltoniano, Eq. (3.1), como

$$H = H_\theta + H_\phi + \epsilon \sum_{i=1}^N \cos(\theta_i - \phi_i) , \quad (3.4)$$

onde explicitamos a relação com o modelo HMF e o termo de interação.

A energia média por par, $\varepsilon = H/N$, é escrita como

$$\varepsilon = \varepsilon_\theta + \varepsilon_\phi + \epsilon \langle \cos(\theta - \phi) \rangle , \quad (3.5)$$

onde

$$\varepsilon_x = \frac{\langle p_x^2 \rangle}{2} + \frac{1 - M_x}{2} , \quad x = \theta, \phi.$$

Podemos escrever a energia individual, do i -ésimo par, da seguinte maneira

$$u = (\theta_i, \phi_i, p_{\theta i}, p_{\phi i}) = u_\theta + u_\phi + \epsilon \cos(\theta_i - \phi_i) , \quad (3.6)$$

onde

$$u_x = \frac{p_{xi}^2}{2} + 1 - M_x \cos(x_i) , \quad x = \theta, \phi.$$

3.1 Equilíbrio termodinâmico

A função de partição desse modelo pode ser calculada analiticamente com auxílio da transformação de Hubbard-Stratonovich (Eq. 2.9), de forma que

$$\begin{aligned} Z &= \int d\boldsymbol{\theta} d\boldsymbol{\phi} d\mathbf{p}_\theta d\mathbf{p}_\phi e^{-\beta H} \\ &= \int d\boldsymbol{\theta} d\boldsymbol{\phi} d\mathbf{p}_\theta d\mathbf{p}_\phi e^{-\frac{\beta}{2} \sum_{i=1}^N (p_{\theta i}^2 + p_{\phi i}^2) - \beta \epsilon \sum_{i=1}^N \cos(\theta_i - \phi_i) - N \frac{\beta}{2} (2 - M_\theta^2 - M_\phi^2)} \\ &= \left(\frac{2\pi}{\beta} \right)^N e^{-N\beta} \int_{-\pi}^{\pi} d\boldsymbol{\theta} \int_{-\pi}^{\pi} d\boldsymbol{\phi} e^{-\beta \epsilon \sum_{i=1}^N \cos(\theta_i - \phi_i) + \frac{N\beta}{2} (M_\theta^2 + M_\phi^2)} \\ &= e^{-N\beta} \left(\frac{2\pi}{\beta} \right)^N \left(\frac{N\beta}{2\pi} \right) \int_{-\pi}^{\pi} d\boldsymbol{\theta} \int_{-\pi}^{\pi} d\boldsymbol{\phi} e^{-\beta \epsilon \sum_{i=1}^N \cos(\theta_i - \phi_i)} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{N\beta}{2} (x^2 + y^2) + N\beta (M_\theta x + M_\phi y)} , \end{aligned}$$

ou, de maneira compacta,

$$Z = e^{-N\beta} \left(\frac{2\pi}{\beta} \right)^N J ,$$

onde

$$\begin{aligned} J &= \left(\frac{N\beta}{2\pi} \right) \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \int_{-\pi}^{\pi} d\phi e^{-\beta\epsilon \sum_{i=1}^N \cos(\theta_i - \phi_i)} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-N\beta \left(\frac{x^2 + y^2}{2} \right) + \beta(\sum_{i=1}^N \cos\theta_i x + \sum_{i=1}^N \cos\phi_i y)} \\ &= \left(\frac{N\beta}{2\pi} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-N\beta \left(\frac{x^2 + y^2}{2} \right)} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \int_{-\pi}^{\pi} d\phi \prod_{i=1}^N e^{-\beta\epsilon \cos(\theta_i - \phi_i) + \beta(\cos\theta_i x + \cos\phi_i y)} \\ &= \left(\frac{N\beta}{2\pi} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-N\beta \left(\frac{x^2 + y^2}{2} \right)} \left[\int_{-\pi}^{\pi} d\theta_i \int_{-\pi}^{\pi} d\phi_i e^{-\beta\epsilon \cos(\theta_i - \phi_i) + \beta(\cos\theta_i x + \cos\phi_i y)} \right]^N \\ &= \left(\frac{N\beta}{2\pi} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-N\beta \left(\frac{x^2 + y^2}{2} \right)} \prod_{i=1}^N \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \int_{-\pi}^{\pi} d\phi e^{-\beta\epsilon \cos(\theta - \phi) + \beta(\cos\theta x + \cos\phi y)} . \end{aligned}$$

Definindo

$$g(x,y) = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \int_{-\pi}^{\pi} d\phi e^{-\beta\epsilon \cos(\theta - \phi) + \beta(\cos\theta x + \cos\phi y)} ,$$

podemos escrever

$$J = \left(\frac{N\beta}{2\pi} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-N \left(\beta \left(\frac{x^2 + y^2}{2} \right) - \ln g(x,y) \right)} ,$$

pois, no limite termodinâmico, podemos usar o método do ponto de sela e identificar a energia livre de Helmholtz,

$$f \sim \inf \left[\left(\frac{x^2 + y^2}{2} \right) - \frac{1}{\beta} \ln g(x,y) \right] .$$

Maximizando f em relação aos parâmetros x e y , obtemos as seguintes equações autoconsistentes

$$\begin{aligned} \beta x^* &= \frac{1}{g(x,y)} \frac{\partial g(x,y)}{\partial x} \Big|_{x=x^*} \\ &= \frac{1}{\int_{-\pi}^{\pi} d\theta \int_{-\pi}^{\pi} d\phi e^{-\beta\epsilon \cos(\theta - \phi) + \beta(\cos\theta x^* + \cos\phi y^*)}} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \int_{-\pi}^{\pi} d\phi \beta \cos\theta e^{-\beta\epsilon \cos(\theta - \phi) + \beta(\cos\theta x^* + \cos\phi y^*)} \\ \beta y^* &= \frac{1}{g(x,y)} \frac{\partial g(x,y)}{\partial y} \Big|_{y=y^*} \\ &= \frac{1}{\int_{-\pi}^{\pi} d\theta \int_{-\pi}^{\pi} d\phi e^{-\beta\epsilon \cos(\theta - \phi) + \beta(\cos\theta x^* + \cos\phi y^*)}} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \int_{-\pi}^{\pi} d\phi \beta \cos\phi e^{-\beta\epsilon \cos(\theta - \phi) + \beta(\cos\theta x^* + \cos\phi y^*)} . \end{aligned}$$

Assim determinamos as magnetizações de equilíbrio,

$$\begin{aligned} x^* &= M_{\theta} \quad e \\ y^* &= M_{\phi} . \end{aligned}$$

3.2 Dinâmica Molecular

Exploramos a evolução deste modelo por meio de uma simulação de Dinâmica Molecular, utilizando o mesmo algoritmo simplético do capítulo anterior [33]. O hamiltoniano 3.1, permite determinar, através das equações de Hamilton, as equações de movimento para θ_i e ϕ_i

$$\ddot{\theta}_i = -M_\theta \text{sen}(\theta_i) + \epsilon \text{sen}(\theta_i - \phi_i) \quad (3.7)$$

$$\ddot{\phi}_i = -M_\phi \text{sen}(\phi_i) - \epsilon \text{sen}(\theta_i - \phi_i) \quad (3.8)$$

onde M_θ e M_ϕ são dadas pelas equações (3.2) e (3.3) respectivamente.

Em $t=0$ as partículas são distribuídas de maneira independente, de acordo com uma distribuição *waterbag* centrada em 0 no primeiro sistema, e em π no segundo (Fig. (3.1)). Tal distribuição é expressa através da seguinte função

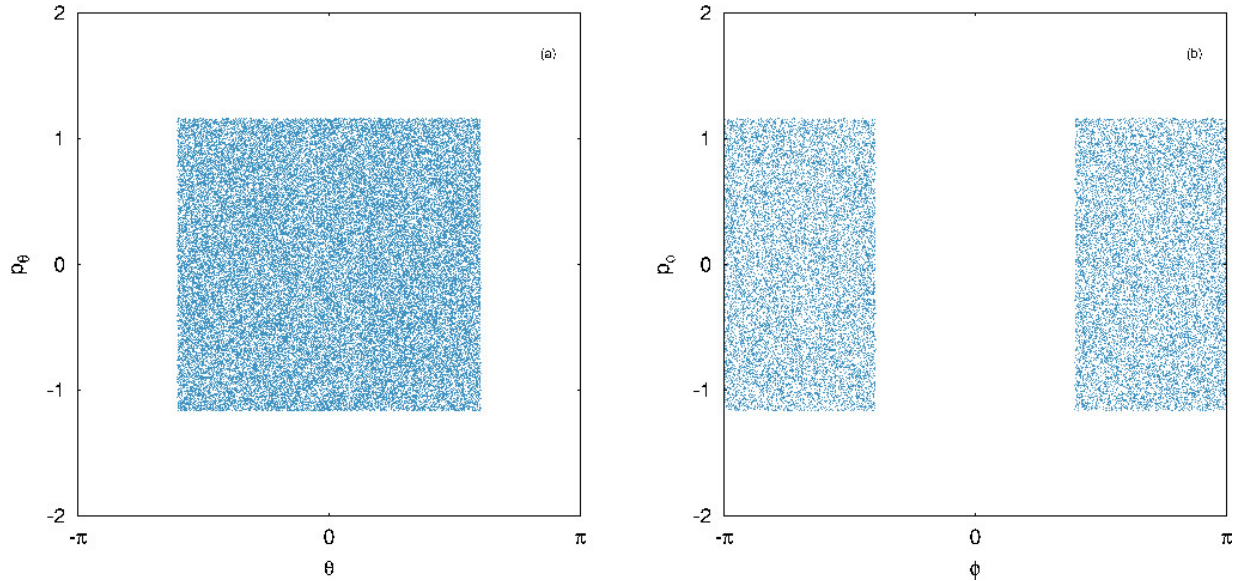


Fig. 3.1: Exemplo de uma distribuição *waterbag* centrada em 0 (a) e centrada em π (b), com $N = 5 \times 10^4$, $\varepsilon_\theta = \varepsilon_\phi = 0.6$ e $M_\theta = M_\phi = 0.5$.

$$f(\theta, \phi, p_\theta, p_\phi) = \eta \Theta(|\theta| - \theta_m) \Theta(|p_\theta| - p_\theta^m) \Theta(|\phi - \pi| - \phi_m) \Theta(|p_\phi| - p_{\phi m}), \quad (3.9)$$

onde

$$\eta = \frac{1}{16p_\theta^m p_{\phi m} \theta_m \phi_m}$$

é a constante de normalização. A escolha dessa distribuição inicial reflete nossa expectativa de que, para $\epsilon \geq 0$, o estado de equilíbrio termodinâmico desse modelo possua magnetizações com módulo iguais e sinais opostos $M_\theta = -M_\phi$ e que isso sirva como *ansatz* para obtermos uma Condição Virial Generalizada.

Assim, obtemos as seguintes expressões para as magnetizações iniciais

$$M_\theta(0) = \frac{\text{sen}(\theta_m)}{\theta_m}, \quad (3.10)$$

$$M_\phi(0) = -\frac{\text{sen}\phi_m}{\phi_m}, \quad (3.11)$$

e para os valores máximos de momentum

$$p_\theta^m = \sqrt{3(2\varepsilon_\theta - 1 + M_\theta(0)^2)},$$

$$p_\phi^m = \sqrt{3(2\varepsilon_\phi - 1 + M_\phi(0)^2)},$$

onde ε_θ e ε_ϕ são, respectivamente, a energia do primeiro e do segundo sistema.

3.3 A condição virial

Vamos obter a condição virial generalizada para o modelo HMF-ladder, o que nos permitirá obtermos as magnetizações virializadas que serão utilizadas para estudar a dinâmica de partícula teste que, por sua vez, servirá como sonda para o sistema de N-corpos.

Assim, considerando um sistema cuja função de distribuição de uma partícula é dada pela Eq. 3.9, e utilizando o teorema virial, Eq. (2.16), temos

$$\begin{aligned} \langle p_\theta^2 \rangle &= - \int dp_\theta dp_\phi d\theta d\phi f(\theta, \phi, p_\theta, p_\phi) [-M_\theta \text{sen}(\theta) + \epsilon \text{sen}(\theta - \phi)] \theta \\ &= -4\eta p_\theta^m p_\phi^m \int d\phi d\theta \Theta(|\theta| - \theta_m) \Theta(|\phi - \pi| - \phi_m) [-M_\theta \text{sen}(\theta) + \epsilon \text{sen}(\theta - \phi)] \theta \\ &= -4\eta p_\theta^m p_\phi^m \left[-2M_\theta \phi_m \int_{-\theta_m}^{\theta_m} d\theta \text{sen}(\theta) \theta + \epsilon \int_{-\phi_m + \pi}^{\phi_m + \pi} \int_{-\theta_m}^{\theta_m} d\phi d\theta \text{sen}(\theta - \phi) \theta \right] \\ &= -\frac{1}{4\theta_m \phi_m} [-2M_\theta \phi_m (-2\theta_m \cos(\theta_m) + 2 \text{sen}(\theta_m)) + 4\epsilon \theta_m \text{sen}(\phi_m) \cos(\theta_m) \\ &\quad - 4\epsilon \text{sen}(\phi_m) \phi_m \text{sen}(\theta_m)] \\ &= M_\theta \frac{\text{sen}(\theta_m)}{\theta_m} - M_\theta \cos(\theta_m) - \epsilon \frac{\text{sen}(\phi_m)}{\phi_m} \cos(\theta_m) + \epsilon \frac{\text{sen}(\phi_m)}{\phi_m} \frac{\text{sen}(\theta_m)}{\theta_m}, \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
 \langle p_\phi^2 \rangle &= -\eta \int dp_\theta dp_\phi d\theta d\phi f(\theta, \phi, p_\theta, p_\phi) [-M_\phi \text{sen}(\phi) - \epsilon \text{sen}(\theta - \phi)] \phi \\
 &= -4\eta p_\theta^m p_\phi^m \int d\phi d\theta \Theta(|\theta| - \theta_m) \Theta(|\phi - \pi| - \phi_m) [-M_\phi \text{sen}(\phi) - \epsilon \text{sen}(\theta - \phi)] \phi \\
 &= -4\eta p_\theta^m p_\phi^m \left[-2M_\phi \theta_m \int_{-\phi_m + \pi}^{\phi_m + \pi} d\phi \text{sen}(\phi) \phi - \epsilon \int_{-\phi_m + \pi}^{\phi_m + \pi} \int_{-\theta_m}^{\theta_m} d\phi d\theta \text{sen}(\theta - \phi) \phi \right] \\
 &= -\frac{1}{4\theta_m \phi_m} [-2M_\phi \theta_m (2\phi_m \cos(\phi_m) - 2 \text{sen}(\phi_m)) + 4\epsilon \phi_m \cos(\phi_m) \text{sen}(\theta_m) \\
 &\quad - 4\epsilon \text{sen}(\phi_m) \text{sen}(\theta_m)] \\
 &= -M_\phi \frac{\text{sen}(\phi_m)}{\phi_m} + M_\phi \cos(\phi_m) - \epsilon \frac{\text{sen}(\theta_m)}{\theta_m} \cos(\phi_m) + \epsilon \frac{\text{sen}(\phi_m)}{\phi_m} \frac{\text{sen}(\theta_m)}{\theta_m},
 \end{aligned}$$

ou, utilizando as expressões (3.3) e (3.2),

$$\langle p_\theta^2 \rangle = M_\theta^2 - M_\theta \cos(\theta_m) + \epsilon M_\phi \cos(\theta_m) - \epsilon M_\phi M_\theta \quad e \quad (3.12a)$$

$$\langle p_\phi^2 \rangle = M_\phi^2 + M_\phi \cos(\phi_m) - \epsilon M_\theta \cos(\phi_m) - \epsilon M_\phi M_\theta. \quad (3.12b)$$

Na condição virial, M_θ e M_ϕ oscilam de maneira desprezível e, portanto, esperamos que a contribuição do termo de acoplamento $\epsilon \langle \cos(\theta - \phi) \rangle$ para a energia, seja constante e dada por $\epsilon M_\theta M_\phi$ ao longo de toda evolução. Além disso, supomos que a energia de cada termo do tipo HMF é igual ($\varepsilon_\theta = \varepsilon_\phi$) e dada por uma constante E . Assim, da conservação de energia, aplicada para cada *waterbag*, temos

$$\langle p_\theta^2 \rangle = 2E - 1 + M_\theta^2 \quad e \quad (3.13a)$$

$$\langle p_\phi^2 \rangle = 2E - 1 + M_\phi^2. \quad (3.13b)$$

Podemos substituir as equações acima no lado esquerdo das equações (3.12), obtendo as seguintes expressões para a condição virial generalizada

$$0 = 2E - 1 + \cos(\theta_m)(M_\theta - \epsilon M_\phi) + \epsilon M_\phi M_\theta \quad e \quad (3.14a)$$

$$0 = 2E - 1 - \cos(\phi_m)(M_\phi - \epsilon M_\theta) + \epsilon M_\phi M_\theta. \quad (3.14b)$$

A Fig. (3.2) compara a curva teórica, dada pela solução das equações acima, com a curva obtida através da dinâmica molecular com $N = 2.5 \times 10^5$ no instante $t_D = 500$ para diferentes valores de ϵ . Vemos que o acordo entre as curvas piora a medida que aumentamos a energia E e/ou a intensidade do acoplamento ϵ . Atribuímos a primeira fonte de erro aos

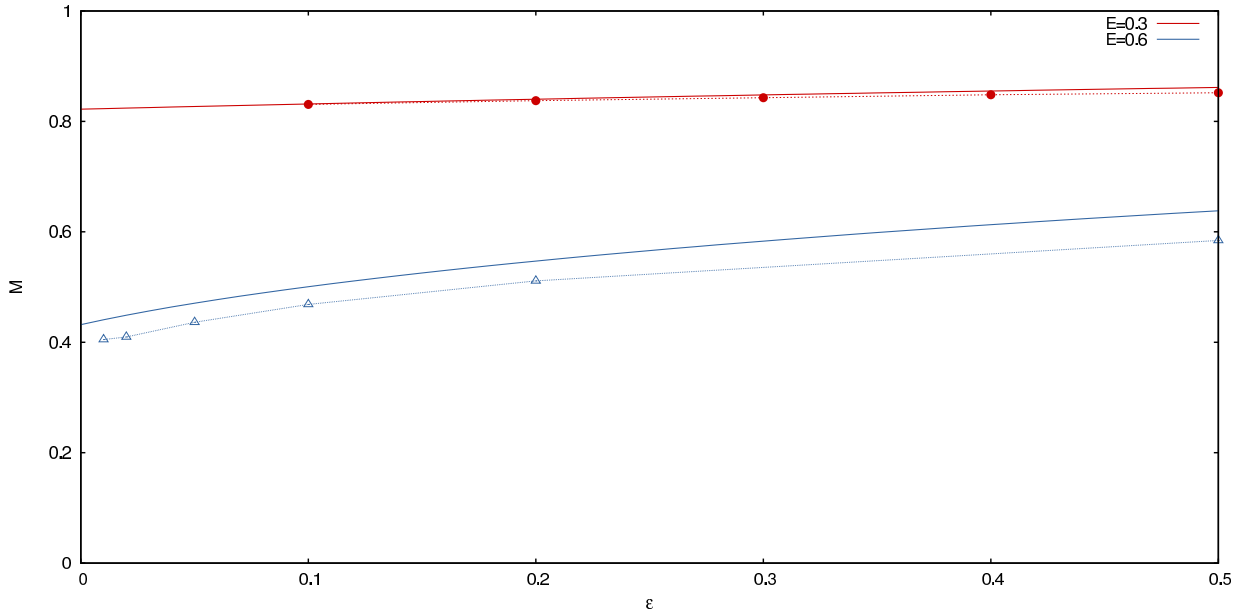


Fig. 3.2: Comparação entre a curva virial (linha sólida) obtida através da Eq.(3.14) para $E = 0.3$ (vermelho) e 0.6 (azul) com $\epsilon \in [0,0.5]$, e a os valores obtidos através da dinâmica molecular (pontos) com $N = 2.5 \times 10^5$ no instante $t_D = 500$ para valores de ϵ neste mesmo intervalo.

efeitos de N finito, pois essa também está presente para $\epsilon = 0$. À segunda, relacionamos a hipótese de conservação de energia entre os sistemas, pois com o aumento do acoplamento esperamos que as interações (e trocas de energia) tornem-se mais relevantes.

Ainda, a figure (3.3) mostra a evolução da magnetização, a partir da condição virial com $\epsilon = 0.01$, para valores distintos de energia. Mais uma vez, o que vemos é uma limitação da aproximação virial.

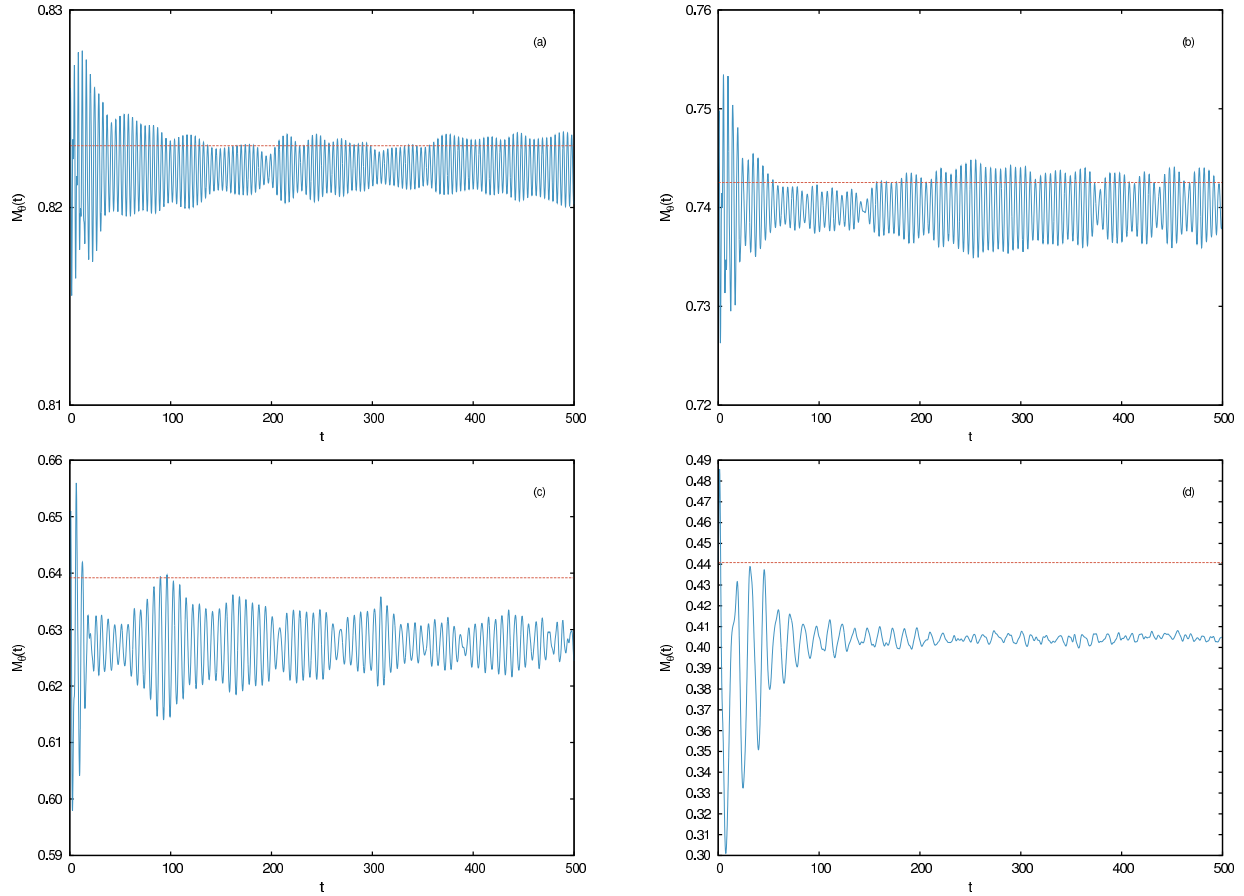


Fig. 3.3: Comparação da magnetização $M_\theta(t)$ com a magnetização virial prevista pelas Eq. (3.14). O valor de ϵ é 0.01 e as magnetizações iniciais são $M_\theta = -M_\phi = 0.823128$ com $E = 0.3$ (a), $E = 0.4$ (b), $E = 0.5$ (c) e $E = 0.6$ (d).

3.4 A equação de envelope

Iremos obter a equação de envelope para o modelo HMF-Ladder. Essa equação deve ser válida para condições iniciais com baixas energias e para $\epsilon \ll 1$. No que segue, vamos aplicar o mesmo procedimento do capítulo anterior ao novo modelo.

O envelope da distribuição em θ é definido como

$$\theta_e(t) = \sqrt{3 \langle \theta^2(t) \rangle}, \quad (3.15)$$

tal que, para $t = 0$, θ_e coincide com θ_m . Portanto sua equação dinâmica é idêntica a deduzida para o HMF,

$$\ddot{\theta}_e(t) = \frac{3}{\theta_e(t)} \left[\langle \dot{\theta}^2(t) \rangle + \langle \theta(t) \ddot{\theta}(t) \rangle \right], \quad (3.16)$$

onde já desprezamos as correlações entre a variável angular e seu momento conjugado.

O envelope para a distribuição em ϕ é definido tal que, para $t = 0$ temos $\phi_e = \phi_m$ e descrito por

$$\phi_e(t) = \sqrt{3 \langle (\pi - |\phi(t)|)^2 \rangle},$$

Sua dinâmica é obtida através da segunda derivada temporal,

$$\begin{aligned} \ddot{\phi}_e(t) &= \frac{d}{dt} \left[\frac{3}{\phi_e(t)} \langle (\pi - |\phi(t)|) \operatorname{sgn}(\phi(t)) \dot{\phi}(t) \rangle \right] \\ &= -\frac{9}{\phi_e(t)^3} \langle (\pi - |\phi(t)|) \operatorname{sgn}(\phi(t)) \dot{\phi}(t) \rangle + \frac{3}{\phi_e(t)} \left[\langle (\pi - |\phi(t)|) \operatorname{sgn}(\phi(t)) \ddot{\phi}(t) \rangle - \langle \dot{\phi}(t)^2 \rangle \right], \end{aligned}$$

onde a função $\operatorname{sgn}(x)$ vale 1 se $x > 0$, -1 se $x < 0$ e é indeterminada para $x = 0$. Podemos expandir a equação acima, substituir $|\phi(t)| \operatorname{sgn} \phi(t)$ por $\phi(t)$ em todos os termos em que essa expressão aparece e reescrevê-la como

$$\ddot{\phi}_e(t) = -\frac{9\pi}{\phi_e(t)^3} \langle \operatorname{sgn}(\phi(t)) \dot{\phi}(t) \rangle + \frac{3}{\phi_e(t)} \left[\pi \langle \operatorname{sgn}(\phi(t)) \ddot{\phi}(t) \rangle - \langle \phi(t) \ddot{\phi}(t) \rangle - \langle \dot{\phi}(t)^2 \rangle \right].$$

O primeiro termo pode ser eliminado já que estamos considerando uma distribuição de velocidades simétrica em torno de 0 e não correlacionada com ϕ . Portanto a equação de envelope para ϕ_e é

$$\ddot{\phi}_e(t) = \frac{3}{\phi_e(t)} \left[\pi \langle \operatorname{sgn}(\phi(t)) \ddot{\phi}(t) \rangle - \langle \phi(t) \ddot{\phi}(t) \rangle - \langle \dot{\phi}(t)^2 \rangle \right]. \quad (3.17)$$

Na condição virial temos que $\ddot{\theta}_e = 0$ e $\ddot{\phi}_e = 0$, ou

$$0 = \langle \dot{\theta}^2(t) \rangle + \langle \theta(t) \ddot{\theta}(t) \rangle \quad (3.18a)$$

$$0 = \langle \dot{\phi}(t)^2 \rangle + \langle \phi(t) \ddot{\phi}(t) \rangle - \pi \langle \operatorname{sgn}(\phi(t)) \ddot{\phi}(t) \rangle. \quad (3.18b)$$

Usando as equações 3.8, podemos escrever

$$0 = \langle \dot{\theta}^2(t) \rangle - M_\theta(t) \langle \theta(t) \operatorname{sen}(\theta(t)) \rangle + \epsilon \langle \operatorname{sen}(\theta(t) - \phi(t)) \rangle \quad (3.19a)$$

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \dot{\phi}^2(t) \rangle - M_\phi(t) [\pi \langle \phi(t) \operatorname{sen}(\phi(t)) \operatorname{sgn} \phi(t) \rangle - \langle \phi(t) \operatorname{sen} \phi(t) \rangle] \\ &\quad + \epsilon [\langle \pi \operatorname{sen}(\theta(t) - \phi(t)) \operatorname{sgn} \phi(t) \rangle - \langle \phi(t) \operatorname{sen}(\theta(t) - \phi(t)) \rangle]. \end{aligned} \quad (3.19b)$$

As médias que aparecem nas equações acima podem ser obtidas usando a distribuição 3.9. Isso posto, temos

$$\begin{aligned}\langle \theta(t) \text{sen}\theta(t) \rangle &= \frac{1}{2\theta_e(t)} \int_{-\theta_e(t)}^{\theta_e(t)} \theta(t) \text{sen}\theta(t) d\theta \\ &= \frac{\text{sen}\theta_e(t)}{\theta_e(t)} - \cos\theta_e(t) \\ &= M_\theta - \cos\theta_e(t) ,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle \theta(t) \text{sen}(\theta(t) - \phi(t)) \rangle &= \langle \theta(t) \text{sen}\theta(t) \rangle \langle \cos\phi(t) \rangle - \langle \theta(t) \cos\theta(t) \rangle \langle \text{sen}\phi(t) \rangle \\ &= M_\phi(t) \langle \theta(t) \text{sen}\theta(t) \rangle \\ &= M_\phi(t)(M_\theta(t) - \cos\theta_e(t)) ,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle \text{sen}\phi(t) \text{sgn}\phi(t) \rangle &= - \int_{-\phi+\pi}^{\pi} \text{sen}\phi(t) d\phi + \int_{\pi}^{\phi+\pi} \text{sen}\phi(t) d\phi \\ &= \frac{1 - \cos\phi_e(t)}{\phi_e(t)} ,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle \phi(t) \text{sen}\phi(t) \rangle &= \int_{-phi+\pi}^{\phi+\pi} \phi(t) \text{sen}\phi(t) d\phi \\ &= \frac{\pi}{\phi_e(t)} (1 - \cos\phi_e(t)) + \cos\phi_e(t) - \frac{\text{sen}\phi_e(t)}{\phi_e(t)} \\ &= \frac{\pi}{\phi_e(t)} (1 - \cos\phi_e(t)) + \cos\phi_e(t) + M_\phi(t) ,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle \text{sen}(\theta(t) - \phi(t)) \text{sgn}\phi(t) \rangle &= \langle \text{sen}\theta(t) \rangle \langle \cos\phi(t) \text{sgn}\phi(t) \rangle - \langle \cos\theta(t) \rangle \langle \text{sen}\phi(t) \text{sgn}\phi(t) \rangle \\ &= M_\theta(t)(1 - \cos\phi_e(t))\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}\langle \text{sen}(\theta(t) - \phi(t))\phi(t) \rangle &= \langle \text{sen}\theta(t) \rangle \langle \cos\phi(t)\phi(t) \rangle - \langle \cos\theta(t) \rangle \langle \text{sen}\phi(t)\phi(t) \rangle \\ &= -M_\theta(t) \left[\frac{\pi}{\theta_e(t)} (1 - \cos\phi_e(t)) + \cos\phi_e(t) + M_\phi(t) \right] .\end{aligned}$$

Substituindo essas expressões nas equações (3.19), resulta que

$$0 = \langle \dot{\theta}(t)^2 \rangle - M_\theta(t)^2 + \cos(\theta_e)(M_\theta - \epsilon M_\phi) + \epsilon M_\phi M_\theta \quad e \quad (3.20a)$$

$$0 = \langle \dot{\phi}(t)^2 \rangle - M_\phi(t)^2 - \cos(\phi_e)(M_\phi - \epsilon M_\theta) + \epsilon M_\phi M_\theta , \quad (3.20b)$$

que concorda com a forma (3.12), deduzida através do teorema virial. Assim, utilizando as mesmas hipóteses da seção anterior, recuperamos a condição virial generalizada (3.14). Dessa forma, as equações (3.16) e (3.17) podem ser reescritas, tendo em vista que os termos entre colchetes são dados pelas equações (3.14), como

$$\ddot{\theta}_e(t) = \frac{3}{\theta_e(t)} [2E - 1 + \cos(\theta_e)(M_\theta - \epsilon M_\phi) + \epsilon M_\phi M_\theta] \quad (3.21a)$$

$$\ddot{\phi}_e(t) = \frac{3}{\phi_e(t)} [2E - 1 - \cos(\phi_e)(M_\phi - \epsilon M_\theta) + \epsilon M_\phi M_\theta] . \quad (3.21b)$$

3.5 O modelo de partícula teste

Para entender o mecanismo por trás da relaxação, analisamos a dinâmica de partículas¹ teste, inicialmente distribuídas de acordo com a Eq. (3.9), dada pelas equações (3.5) e magnetizações virializadas. Iremos proceder de duas maneiras equivalentes, primeiramente, para energia $E = 0.3$, utilizaremos as magnetizações obtidas através da resolução da Eq. (3.14), cuja evolução é governada pelas equações de envelope (3.19). Esse procedimento é o mesmo utilizado para analisar a dinâmica de partículas teste do capítulo anterior e é justificável, pois vamos explorar uma região onde a concordância entre as magnetizações estacionárias obtidas através da dinâmica molecular concorda razoavelmente bem com as obtidas através da aproximação virial.

Por outro lado, para $E = 0.6$, devido à divergência entre as magnetizações virais previstas teoricamente e as obtidas através da dinâmica molecular, iremos fixar a magnetização utilizada no modelo de partícula teste, no seu valor estacionário obtido através da simulação. Em ambos os casos, observamos o comportamento das partículas teste através de seções de Poincaré do plano p_θ vs. θ quando $p_\phi = 0$. Esses resultados encontram-se dispostos nas Fig. (3.4) e (3.5), onde encontram-se tais mapas para valores crescentes de ϵ .

A Fig. (3.4) mostra as seções de Poincaré para $E = 0.3$, com valores crescentes de ϵ e magnetizações ao longo da curva virial teórica (3.14). Vemos que, mesmo para os maiores valores de ϵ , não há sinal de caos.

Já a Fig. (3.5), mostra que, para $E = 0.6$, o aumento do valor de ϵ faz surgirem ilhas de ressonância, que nos fazem suspeitar de não-integrabilidade, o que é confirmado nas figuras (c) e (d), onde observamos o movimento caótico, que é uma evidência irrefutável de

¹ Como partícula, os referimos a elementos dos sistema caracterizados pelo mesmo índice i .

não-integrabilidade. O retorno da regularidade é observado nas figuras (f) e (g), sugerindo que o sistema volta a ser integrável quando o acoplamento entre os pares é suficientemente grande.

Comparando o resultado da dinâmica de partícula teste com os resultados da dinâmica molecular de $N = 10^5$ partículas, apresentado na Fig. (3.6), observamos que o comportamento caótico das partículas teste caracteriza o recuo de uma estrutura que indica o fim do qSS: quanto menor é o número de órbitas integráveis na seção de Poincaré, maior é o recuo, e mais rapidamente o qSS é destruído.

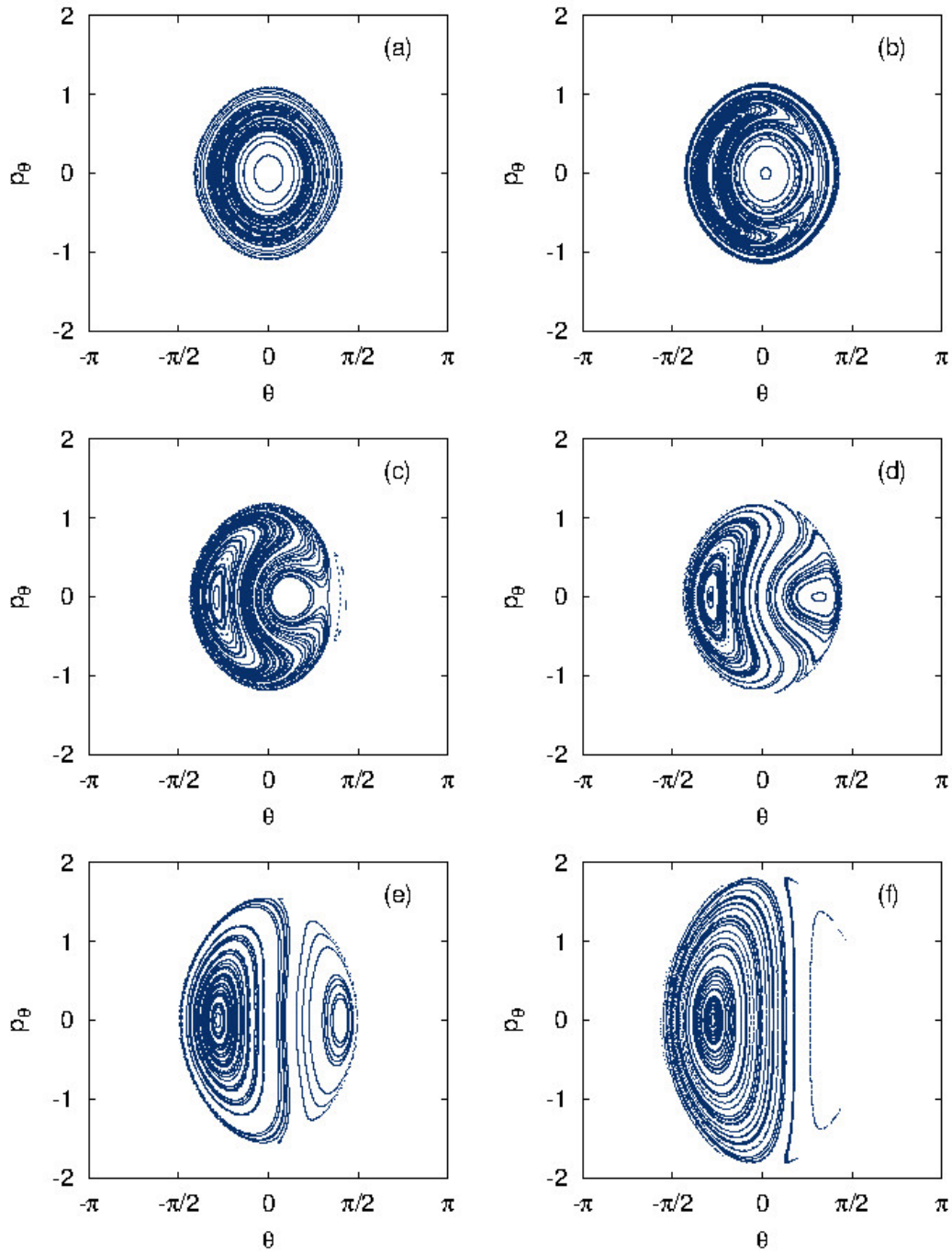


Fig. 3.4: Seções de Poincaré da dinâmica de partícula teste com condições iniciais virilizadas para $E = 0.3$: (a) $\epsilon = 0.001$, $M_\theta = -M_\phi = 0.822$, (b) $\epsilon = 0.01$, $M_\theta = -M_\phi = 0.823$, (c) $\epsilon = 0.05$, $M_\theta = -M_\phi = 0.827$, (d) $\epsilon = 0.1$, $M_\theta = -M_\phi = 0.831$, (e) $\epsilon = 0.5$, $M_\theta = -M_\phi = 0.861$, (f) $\epsilon = 1.0$, $M_\theta = -M_\phi = 0.887$, (g) $\epsilon = 1.5$, $M_\theta = -M_\phi = 0.904$, (h) $\epsilon = 2.0$, $M_\theta = -M_\phi = 0.947$.

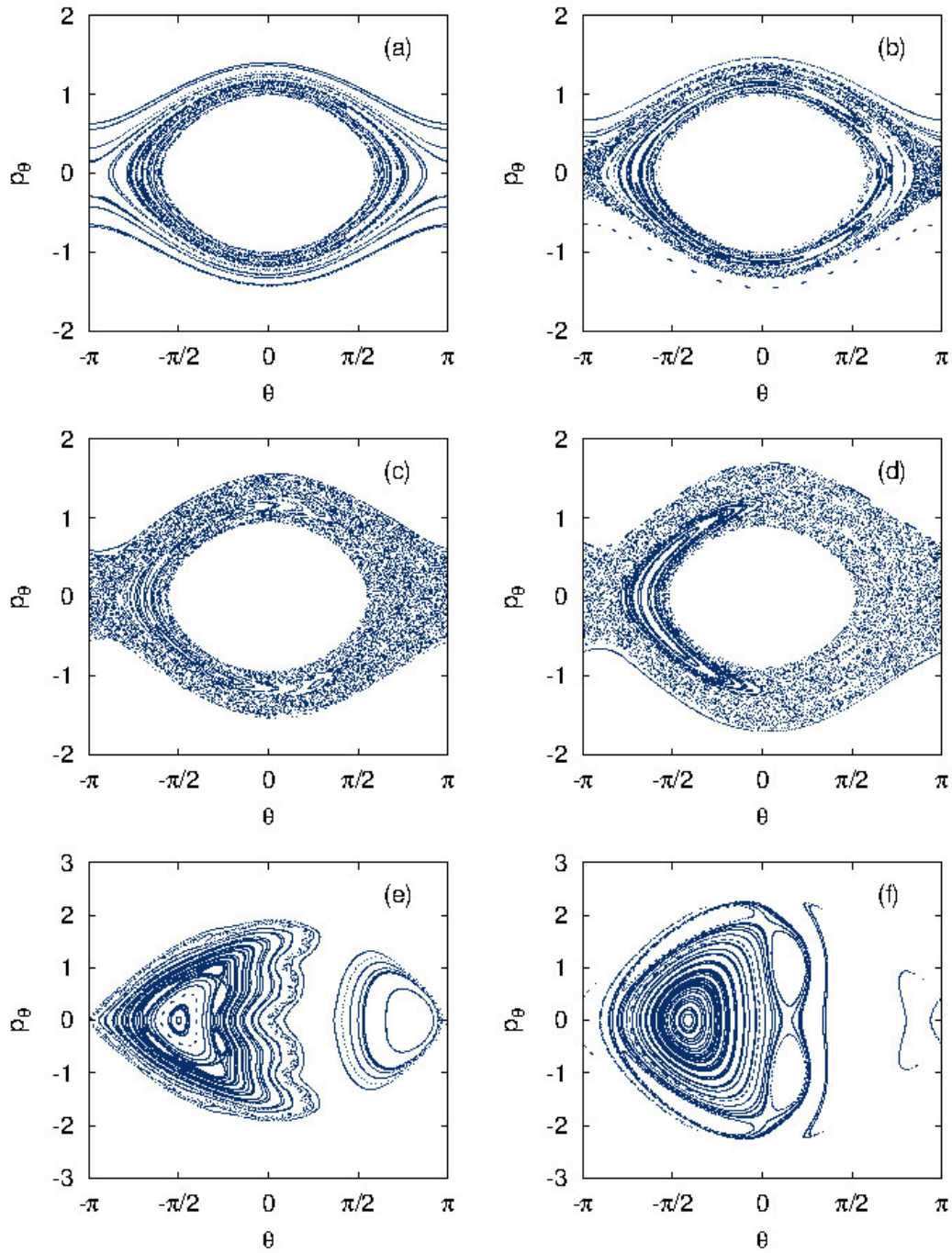


Fig. 3.5: Seções de Poincaré da dinâmica de partícula teste com magnetizações do qSS obtidas através da dinâmica molecular para $N = 2.5 \times 10^5$ no instante $t_D = 500$ e $E = 0.6$: (a) $\epsilon = 0.001$, $M_\theta = -M_\phi = 0.391$, (b) $\epsilon = 0.01$, $M_\theta = -M_\phi = 0.407$, (c) $\epsilon = 0.05$, $M_\theta = -M_\phi = 0.435$, (d) $\epsilon = 0.1$, $M_\theta = -M_\phi = 0.469$, (e) $\epsilon = 0.5$, $M_\theta = -M_\phi = 0.582$, (f) $\epsilon = 1.0$, $M_\theta = -M_\phi = 0.660$, (g) $\epsilon = 1.5$, $M_\theta = -M_\phi = 0.697$, (h) $\epsilon = 2.0$, $M_\theta = -M_\phi = 0.707$.

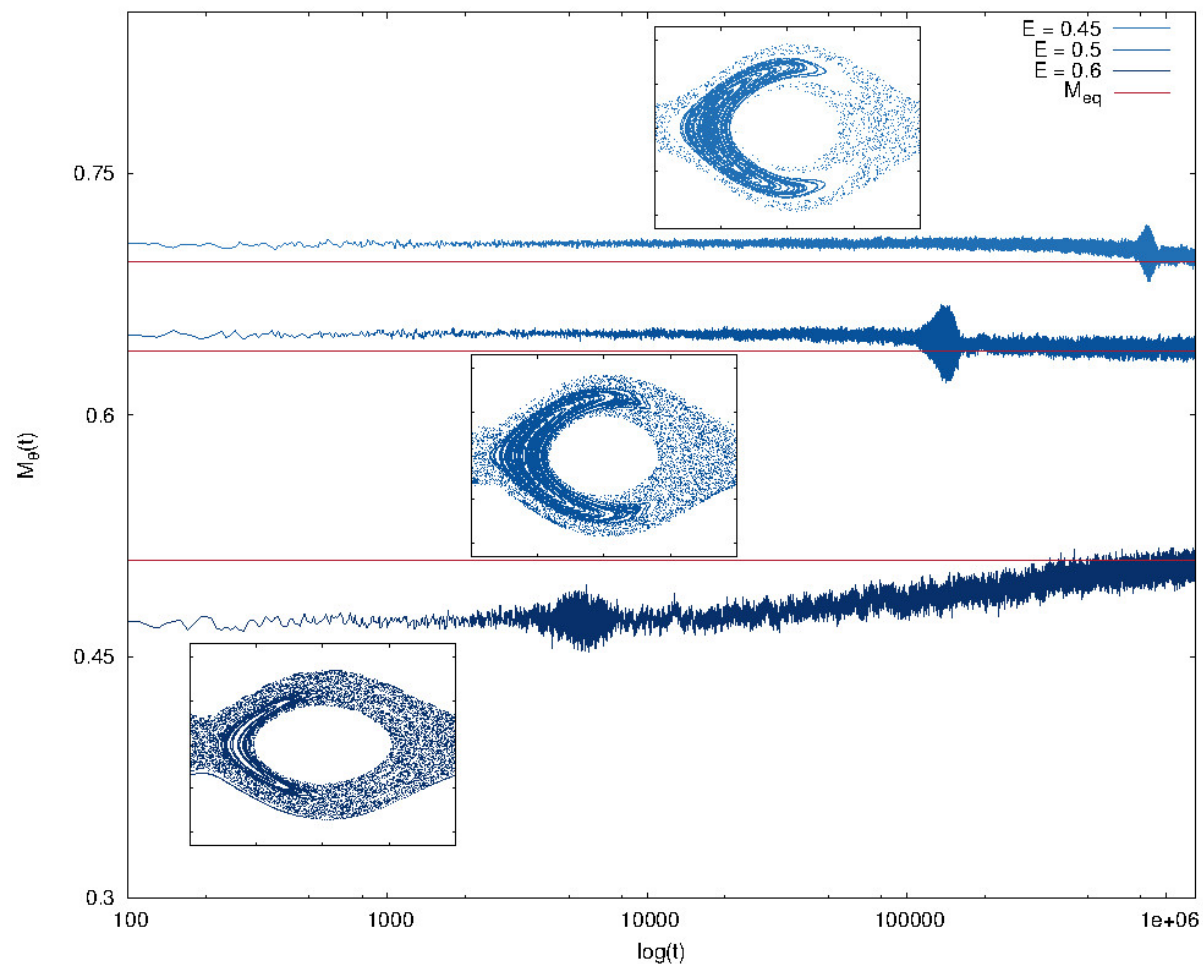


Fig. 3.6: Diagrama contendo a evolução temporal da magnetização $M_\theta(t)$ e os mapas estroboscópicos da dinâmica de partícula teste com magnetizações do qSS obtidas através da dinâmica molecular para $\epsilon = 0.1$ com energias $\epsilon_\theta = \epsilon_\phi = 0.45$, $\epsilon_\theta = \epsilon_\phi = 0.5$ e $\epsilon_\theta = \epsilon_\phi = 0.6$. As linhas vermelhas mostram as magnetizações previstas pela mecânica estatística de equilíbrio e as linhas azuis são os resultados obtidos através da dinâmica molecular de $N = 100000$ partículas.

3.6 Relaxação para o equilíbrio

Como estamos explorando estados inomogêneos, esperamos que os termos colisionais de ordem $1/N$ sejam relevantes, assim como que, de alguma forma, o caos presente no estado qSS tenha um papel decisivo no valor do expoente de relaxação do modelo. Para verificar essas hipóteses, realizamos simulações com $N = 1 \times 10^4, 2 \times 10^4, 4 \times 10^4$ e 8×10^4 partículas, para diferentes valores de ϵ . O parâmetro analisado foi o Kurtosis da distribuição de velocidades, cujo valor para distribuições Gaussianas é 3, como apresentado na Fig 3.7, que compara as distribuições de velocidades ², obtidas através da dinâmica molecular de $N = 30000$ partículas, para $\epsilon = 0.5$, com condições iniciais na Curva Virial Generalizada, após atingido o regime no qual $\kappa \simeq 3$, e as distribuições de equilíbrio previstas pela mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs.

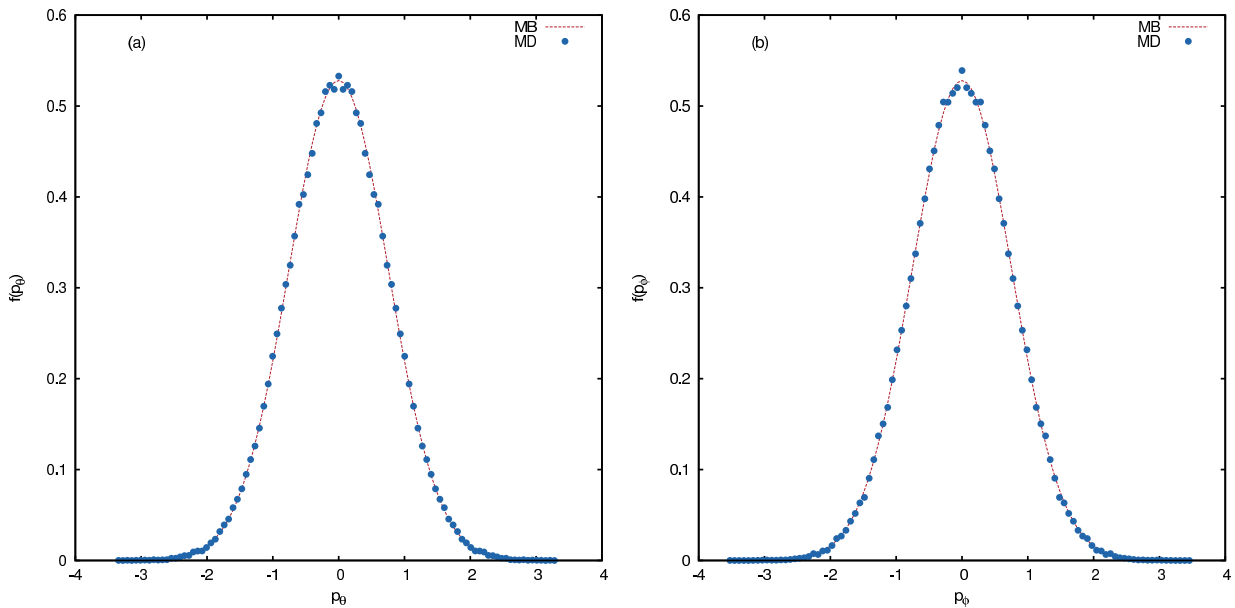


Fig. 3.7: *Distribuições de velocidades, (a) p_θ e (b) p_ϕ , para um sistema inicialmente distribuído como uma waterbag de magnetizações $M_\theta = -M_\phi = 0.638$ e energias $\varepsilon_\theta = \varepsilon_\phi = 0.6$, cuja constante de acoplamento vale $\epsilon = 0.5$. A linha vermelha corresponde à distribuição de equilíbrio termodinâmico e os pontos são obtidos da simulação da dinâmica molecular com $N = 30000$ partículas, após $\kappa \simeq 3$.*

Os dados da evolução temporal do Kurtosis, foram tratados utilizando um algoritmo de suavização (EMWA [38, 39]) e os resultados obtidos estão apresentados na tabela (??)

² Distribuições de velocidades e distribuições de momentum, neste trabalho, são idênticas.

e nas Fig. (??)-(??) .

Verificamos que o expoente característico da relaxação, δ , decresce à medida que aumentamos o acoplamento, até que, em $\epsilon = 0.5$, ele volta a crescer. Se associarmos o valor de δ à presença de caos (pontos dispersos) nos mapas estroboscópicos da Fig. 3.5, esse comportamento concorda com o que observamos: comparando as subfiguras (d), (e) e (f), verificamos que há uma redução progressiva do caos até que, em (g) e (h), algumas órbitas voltam a ser integráveis e o tempo de relaxação passa a depender cada vez menos do tamanho do sistema como. A relação entre o expoente de relaxação e ϵ pode ser vista na figura 1.1.

Esses fatos corroboram com nossas hipóteses iniciais, de que a introdução de um termo de curto alcance levaria o sistema mais rapidamente ao equilíbrio de Boltzmann-Gibbs.

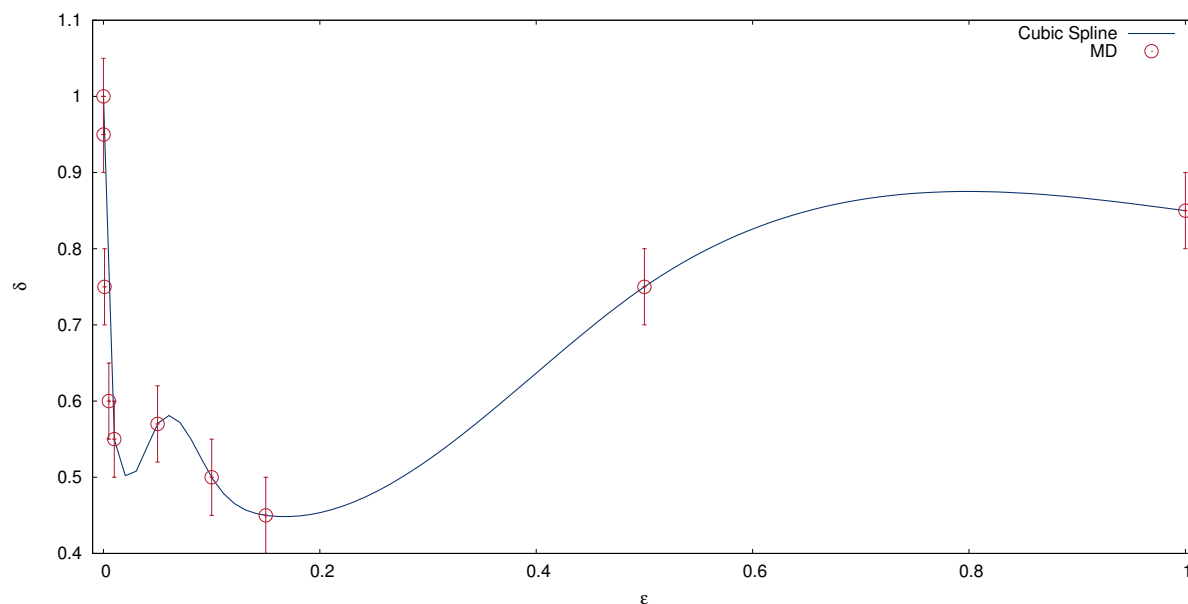


Fig. 3.8: *Relação entre o expoente de relaxação, δ , e o valor da intensidade do acoplamento, ϵ . A curva sólida é resultado do spline cúbico dos pontos obtidos através do colapso das curvas de relaxação (círculos vermelhos). As barras de erro estão incluídas devido às limitações na obtenção dos expoentes δ por causa das flutuações do Kurtosis.*

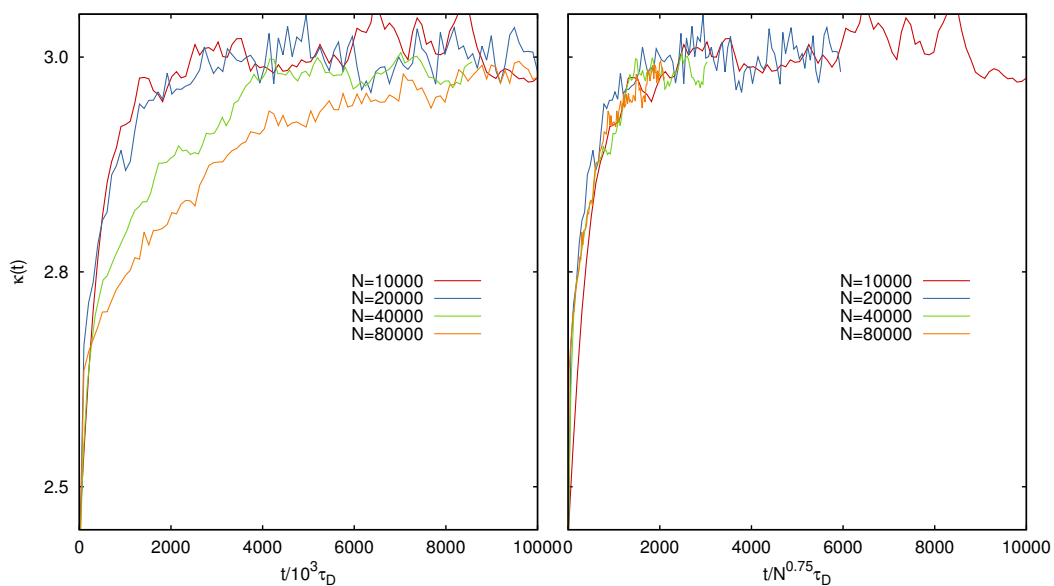


Fig. 3.9: Kurtosis como função do tempo para diferentes de N : 1×10^4 (vermelho), 2×10^4 (azul), 4×10^4 (verde), 8×10^4 (laranja). As condições iniciais são: $E = 0.6$, $\epsilon = 0.001$ e $M = 0.433$.

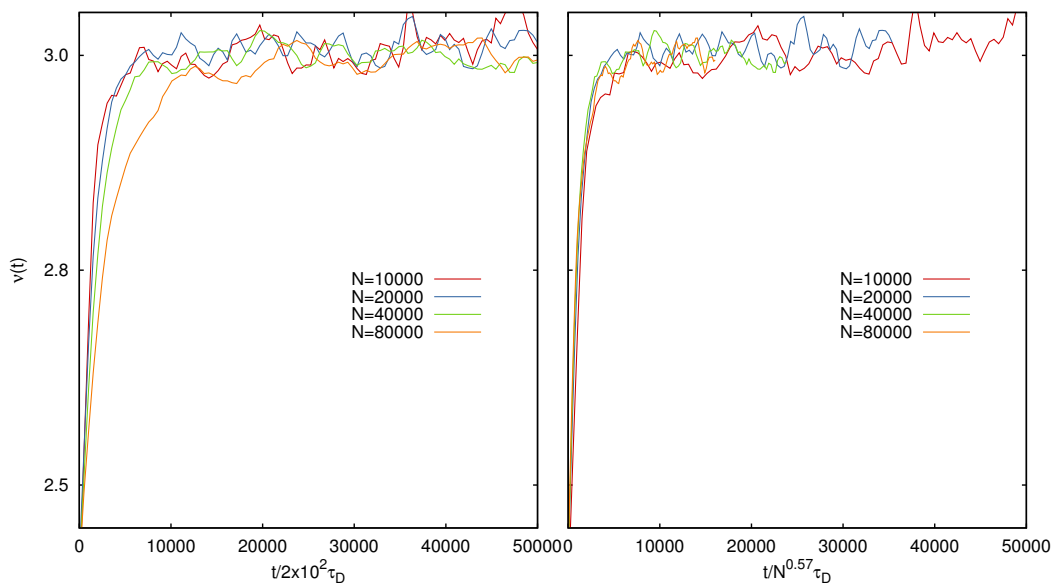


Fig. 3.10: Kurtosis como função do tempo para diferentes de N : 1×10^4 (vermelho), 2×10^4 (azul), 4×10^4 (verde), 8×10^4 (laranja). As condições iniciais são: $E = 0.6$, $\epsilon = 0.05$ e $M = 0.470$.

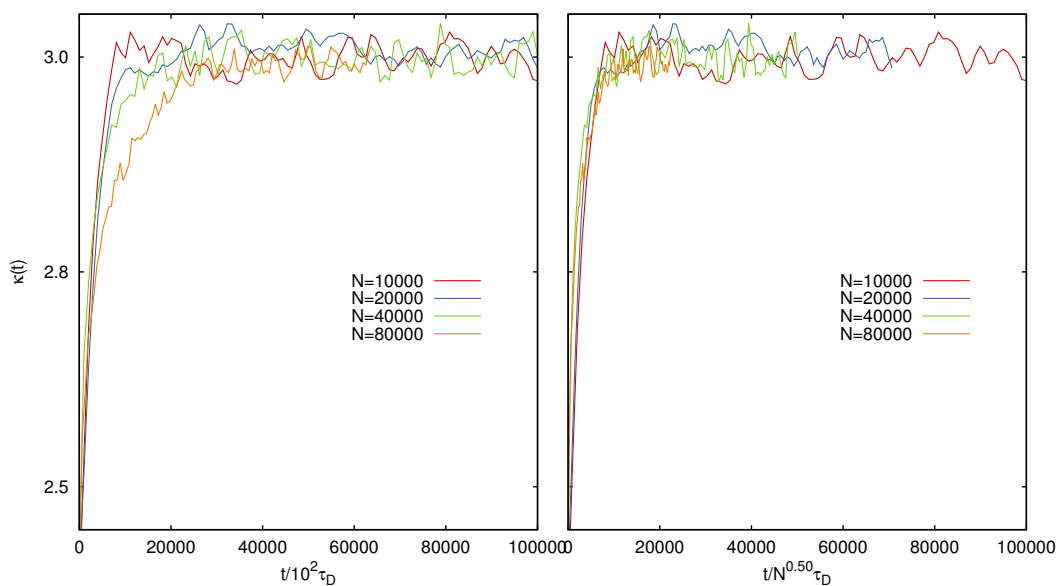


Fig. 3.11: Kurtosis como função do tempo para diferentes de N : 1×10^4 (vermelho), 2×10^4 (azul), 4×10^4 (verde), 8×10^4 (laranja). As condições iniciais são: $E = 0.6$, $\epsilon = 0.1$ e $M = 0.500$.

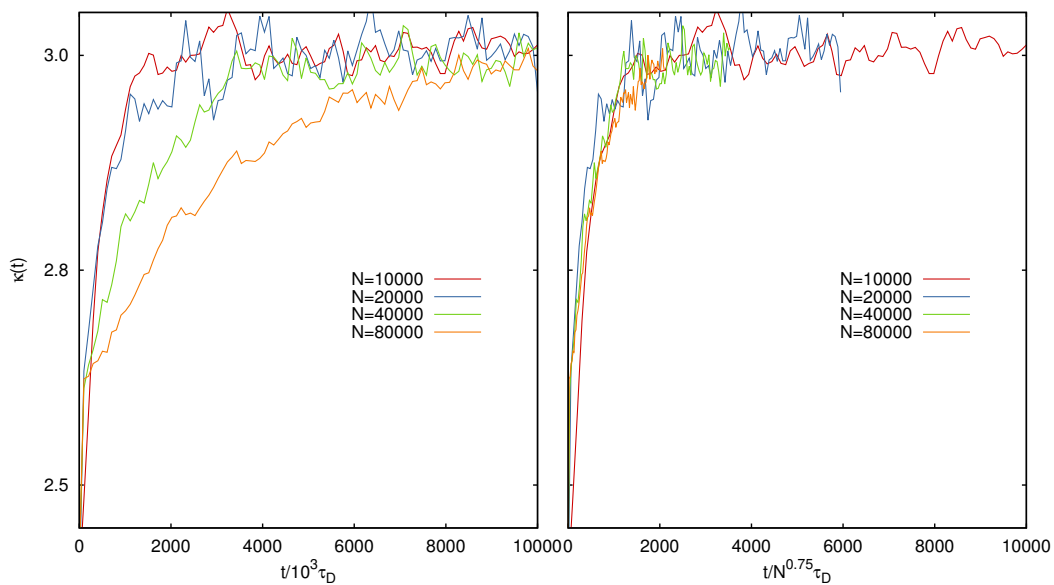


Fig. 3.12: Kurtosis como função do tempo para diferentes de N : 1×10^4 (vermelho), 2×10^4 (azul), 4×10^4 (verde), 8×10^4 (laranja). As condições iniciais são: $E = 0.6$, $\epsilon = 0.5$ e $M = 0.638$.

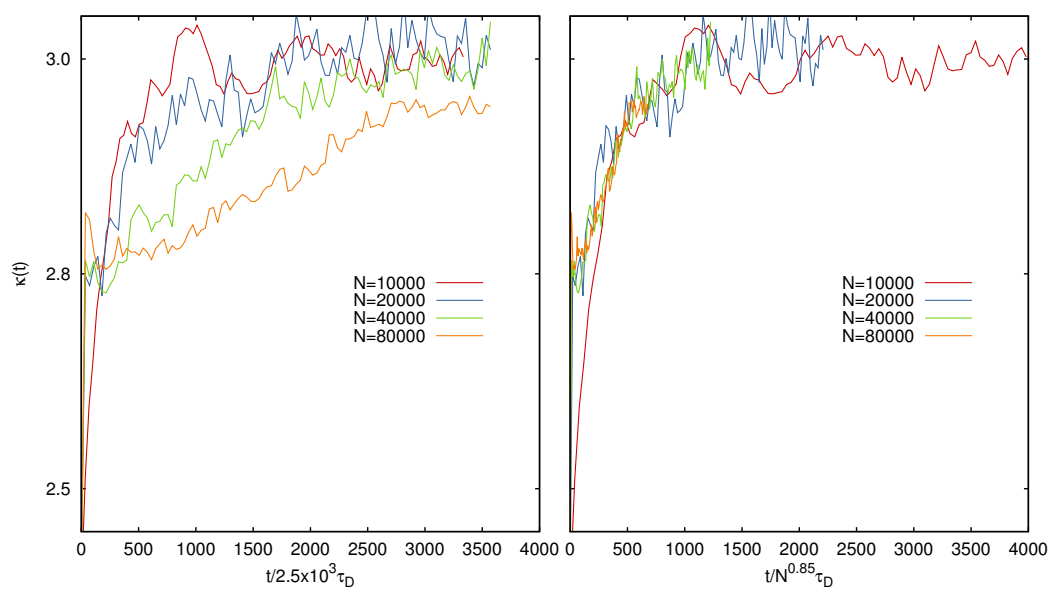


Fig. 3.13: Kurtosis como função do tempo para diferentes de N : 1×10^4 (vermelho), 2×10^4 (azul), 4×10^4 (verde), 8×10^4 (laranja). As condições iniciais são: $E = 0.6$, $\epsilon = 1.0$ e $M = 0.725$.

Capítulo 4

Conclusões e perspectivas

Sumarizando, propusemos um modelo que possui interações de curto e longo alcance, sendo a intensidade da primeira modulada pela constante de acoplamento ϵ . Mostramos que, para uma mesma energia, conforme o aumento do acoplamento, o tempo de relaxação para o equilíbrio de Boltzmann Gibbs diminui. Também, verificamos que, para um mesmo valor de ϵ , o aumento da energia é decisivo para o tempo de vida do qSS. Notavelmente, no regime de parâmetros explorados, verificamos que esse tempo de relaxação mais curto pode estar relacionado ao comportamento caóticos das partículas no estado qSS. Além disso, obtemos uma aproximação para a Condição Virial Generalizada para o modelo HMF-Ladder, que é válida para regimes de baixa energia e ϵ suficientemente pequeno. Todos esses resultados foram quantificados com a obtenção do valor de δ , o expoente característico de relaxação, para diferentes valores de ϵ .

Do ponto de vista da teoria caótica dos sistemas dinâmicos, a relaxação é entendida como *mixing* no espaço de fases e sua escala de tempo é dada pelo tempo de Kolmogorov-Sinai, $\tau_{KS} = 1/h_{KS}$, onde h_{KS} é a entropia de Kolmogorov-Sinai[40]. Portanto nos parece interessante estudar a relação entre a relaxação e algumas quantidades dinâmicas, tais como a entropia de Kolmogorov-Sinai e os expoentes de Lyapunov. Talvez possamos, tendo em vista o que foi desenvolvido neste trabalho, obter uma estimativa teórica para o tempo de relaxação, analogamente ao que foi feito em [41].

Referências Bibliográficas

- [1] Thanu Padmanabhan. Statistical mechanics of gravitating systems. *Physics Reports*, 188(5):285–362, 1990.
- [2] T. N. Teles, Y. Levin, R. Pakter, e F. B. Rizzato. Statistical mechanics of unbound two-dimensional self-gravitating systems. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2010(05):P05007, maio 2010.
- [3] Michael Joyce and Tirawut Worrakitpoonpon. Quasistationary states in the self-gravitating sheet model. *Physical Review E*, 84(1):011139, 2011.
- [4] Jonathan Miller. Statistical mechanics of euler equations in two dimensions. *Physical review letters*, 65(17):2137, 1990.
- [5] Y. Levin, R. Pakter e T. N. Teles. Collisionless Relaxation in Non-Neutral Plasmas. *Physical Review Letters*, 100(4):040604, jan. 2008.
- [6] W.B. Colson. Theory of a free electron laser. *Physics Letters A*, 59(3):187 – 190, 1976.
- [7] Kerson Huang. *Statistical Mechanics*. John Wiley & Sons, 2 edition, 1987.
- [8] Mark Kac. On the Partition Function of a One-Dimensional Gas. *Physics of Fluids*, 2(1):8–12, 1959.
- [9] Julien Barré, David Mukamel, and Stefano Ruffo. Inequivalence of Ensembles in a System with Long-Range Interactions. *Physical Review Letters*, 87(3):30601, June 2001.
- [10] D. Lynden-Bell. Negative Specific Heat in Astronomy, Physics and Chemistry. *Physica A Statistical Mechanics and its Applications*, 263:293–304, February 1999.

- [11] Michael K.-H. Kiessling and Thomas Neukirch. Negative specific heat of a magnetically self-confined plasma torus. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 100(4):1510–1514, 2003.
- [12] D. Lynden-Bell and R. M. Lynden-Bell. On the negative specific heat paradox. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 181:405–419, November 1977.
- [13] Yan Levin, Renato Pakter, Felipe B. Rizzato, Tarcísio N. Teles, and Fernanda P.C. Benetti. Nonequilibrium statistical mechanics of systems with long-range interactions. *Physics Reports*, 535(1):1 – 60, 2014. Nonequilibrium statistical mechanics of systems with long-range interactions.
- [14] A. Campa, T. Dauxois, and S. Ruffo. Statistical mechanics and dynamics of solvable models with long-range interactions. *physrep*, 480:57–159, September 2009.
- [15] Freddy Bouchet and Julien Barré. Statistical mechanics of systems with long range interactions. *Journal of Physics: Conference Series*, 31:18–26, March 2006.
- [16] Ludwig Boltzmann. *Lectures on gas theory. Translated by Stephen G. Brush*. University of California Press Berkeley, 1964.
- [17] J. R.. Dorfman. *An Introduction to Chaos in Nonequilibrium Statistical Mechanics*. Cambridge University Press, 1999.
- [18] W. Braun and K. Hepp. The vlasov dynamics and its fluctuations in the $1/n$ limit of interacting classical particles. *Communications in Mathematical Physics*, 56(2):101–113, 1977.
- [19] Yoshiyuki Y. Yamaguchi, Julien Barré, Freddy Bouchet, Thierry Dauxois, and Stefano Ruffo. Stability criteria of the vlasov equation and quasi-stationary states of the {HMF} model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 337(1–2):36 – 66, 2004.
- [20] F Hohl and D Tilghman Broaddus. Thermalization effects in a one-dimensional self-gravitating system. *Physics Letters A*, 25(10):713–714, 1967.
- [21] A. Figueiredo, T. M. Rocha Filho, A. E. Santana, and M. A. Amato. Scaling of the dynamics of homogeneous states of one-dimensional long-range interacting systems. *ArXiv e-prints*, May 2013.

- [22] K. Jain, F. Bouchet, and D. Mukamel. Relaxation times of unstable states in systems with long range interactions. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 11:8, November 2007.
- [23] D. Mukamel, S. Ruffo, and N. Schreiber. Breaking of ergodicity and long relaxation times in systems with long-range interactions. *Phys. Rev. Lett.*, 95:240604, Dec 2005.
- [24] J. Barré, F. Bouchet, T. Dauxois, S. Ruffo, and Y. Y. Yamaguchi. The Vlasov equation and the Hamiltonian mean-field model. *Physica A Statistical Mechanics and its Applications*, 365:177–183, June 2006.
- [25] P.-H. Chavanis. Kinetic equations for systems with long-range interactions: a unified description. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 5:19, May 2010.
- [26] T. Konishi and K. Kaneko. Clustered motion in symplectic coupled map systems. *Journal of Physics A Mathematical General*, 25:6283–6297, December 1992.
- [27] Mickael Antoni and Stefano Ruffo. Clustering and relaxation in hamiltonian long-range dynamics. *Phys. Rev. E*, 52:2361–2374, Sep 1995.
- [28] P. Valageas. Thermodynamics and dynamics of a 1-d gravitational system. *Astronomy and Astrophysics*, 450:445–459, May 2006.
- [29] J. Dawson. One-Dimensional Plasma Model. *Physics of Fluids*, 5:445–459, April 1962.
- [30] T. Dauxois, P. de Buyl, L. Lori, and S. Ruffo. Models with short- and long-range interactions: the phase diagram and the reentrant phase. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 6:15, June 2010.
- [31] Renato Pakter and Yan Levin. Core-halo distribution in the hamiltonian mean-field model. *Phys. Rev. Lett.*, 106:200603, May 2011.
- [32] Alessandro Campa, Andrea Giansanti, and Daniele Moroni. Canonical solution of classical magnetic models with long-range couplings. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 36(25):6897, 2003.
- [33] I. P. Omelyan, I. M. Mryglod, and R. Folk. Optimized Forest-Ruth- and Suzuki-like algorithms for integration of motion in many-body systems. *Computer Physics Communications*, 146:188–202, July 2002.

-
- [34] Ana C. Ribeiro-Teixeira, Fernanda P. C. Benetti, Renato Pakter, and Yan Levin. Ergodicity breaking and quasistationary states in systems with long-range interactions. *Phys. Rev. E*, 89:022130, Feb 2014.
- [35] Levi Landau. *J. Phys. USSR*, 10(25), 1946.
- [36] David Sagan. On the physics of landau damping. *American Journal of Physics*, 62(5):450–462, 1994.
- [37] Ching-Sheng Wu. Landau damping and resonant energy absorption. *Phys. Rev.*, 127:1419–1422, Sep 1962.
- [38] Charles C Holt. Forecasting seasonals and trends by exponentially weighted moving averages. *International Journal of Forecasting*, 20(1):5–10, 2004.
- [39] Robert Goodell Brown. *Smoothing, forecasting and prediction of discrete time series*. Courier Dover Publications, 2004.
- [40] Toshio Tsuchiya and Naoteru Gouda. Relaxation and lyapunov time scales in a one-dimensional gravitating sheet system. *Physical Review E*, 61(1):948, 2000.
- [41] Bruno Marcos, Andrea Gabrielli, and Michael Joyce. Relaxation of quasi-stationary states in long range interacting systems and a classification of the range of pair interactions. *Central European Journal of Physics*, 10(3):676–683, 2012.

