

Universidade Federal do Paraná

Samyr Ariel Abdulack

Sistemas Dinâmicos em Banhos Estruturados

Curitiba - PR

2014

Universidade Federal do Paraná
Programa de Pós-graduação
Tese de Doutorado

Samyr Ariel Abdulack

Sistemas Dinâmicos em Banhos Estruturados

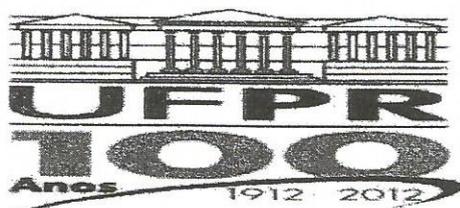
Tese apresentada ao Curso de Pós-graduação em Física da Universidade Federal do Paraná como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de doutor em Física

Orientador: *Prof. Dr. Marcus Werner Beims*

Curitiba - PR

2014

Dedico aos meus pais



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS

CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Fone: (41) 3361-3096 Fax: (41) 3361-3418

E-mail: posgrad@fisica.ufpr.br

PARECER

Os abaixo-assinados membros da banca examinadora de Defesa de Tese de Doutorado do aluno SAMYR ARIEL ABDULACK, consideram aprovada a redação final da tese, cujo título é: “*Sistemas dinâmicos em banhos estruturados*”.

Curitiba, 30 de maio de 2014.

Banca Examinadora

Prof. Dr. Marcus Werner Beims
(UFPR)

Assinatura
MLL

Prof. Dr. Márcio Henrique Franco Bettega
(UFPR)

Márcio H. Franco Bettega

Prof. Dr. Ricardo Luiz Viana
(UFPR)

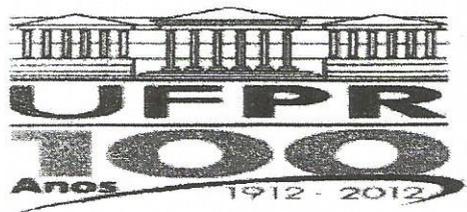
RLV

Prof. Dr. Mário José de Oliveira
(USP)

Mário José de Oliveira

Prof. Dr. Fernando Albuquerque de Oliveira
(UnB)

Fernando A. de Oliveira



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
Fone: (41) 3361-3096 Fax: (41) 3361-3418
E-mail: posgrad@fisica.ufpr.br

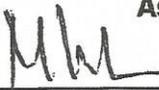
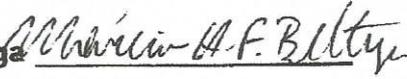
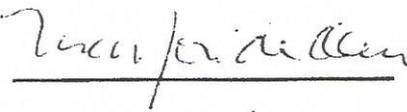
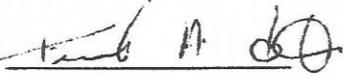
DEFESA DE TESE DE DOUTORADO

Sistemas dinâmicos em banhos estruturados.

ALUNO

SAMYR ARIEL ABDULACK

Em sessão pública iniciada às quatorze horas do dia 30 de maio de 2014, após um seminário sob o título acima e posterior arguição, esta banca examinadora decidiu APROVAR o candidato com o conceito global A.

Banca Examinadora	Assinatura	Conceito
Prof. Dr. Marcus Werner Beims (UFPR)		<u>A</u>
Prof. Dr. Márcio Henrique Franco Bettega (UFPR)		<u>A</u>
Prof. Dr. Ricardo Luiz Viana (UFPR)		<u>A</u>
Prof. Dr. Mário José de Oliveira (USP)		<u>A</u>
Prof. Dr. Fernando Albuquerque de Oliveira (UnB)		<u>A</u>

Agradecimentos

- A Deus, pela vida e pelo amor ao conhecimento.
- Aos meus pais, Célia e Daniel, pelo seu apoio incondicional durante esta etapa e pelo incentivo aos estudos sem medidas.
- À minha irmã Soraya e à toda minha família por sempre me incentivar e acreditar em mim! Também quero citar em especial a minha avó Maria e meu tio Paulo que sempre me apoiaram e acreditaram que eu seria capaz.
- À minha namorada Vanessa, que sempre esteve presente nos momentos difíceis e pelo incentivo a seguir em frente.
- Ao meu orientador, Prof. Dr. Marcus W. Beims, pelo auxílio, incentivo, conhecimentos compartilhados e por acreditar que eu seria capaz.
- Ao Prof. Dr. Walter Strunz, da Technische Universität Dresden, pelos seu conhecimento compartilhado, imenso auxílio durante o período sanduíche na Alemanha e pela cooperação com o grupo!
- Ao Prof. Dr. Sandro E. de S. Pinto, pela orientação no mestrado, pelo incentivo ao doutorado e pelas sempre produtivas conversas.
- Aos amigos de sempre, Rodrigo Pereira e Romeu Szmoski, que além do período de convívio no mestrado, sempre estiveram dispostos a ajudar. Também agradeço aos inesquecíveis amigos Joniel, Tiago Gutierrez, Rudinei e Adriano Dubiel. Ao Marcelo Custódio, um grande amigo. Ao João Carlos Xavier pelas discussões. Também quero agradecer à Natasha Yamamoto! Uma física, mas também psicóloga. Ao Raphael Tromer, sem a ajuda do qual eu talvez não tivesse nem feito a inscrição para o doutorado. Ao meu irmão Eduardo Maschio pelo incentivo sempre. Também quero agradecer aos amigos Fabiano e Patrícia, que me apoiaram desde o início

do doutorado. Preciso mencionar aqui também os amigos Letícia, Liliane, Aryane, Marcone, Rodrigo, André, Otávio, Danilo e Theylor pelas orações e apoio durante esta etapa.

- Aos caríssimos amigos que também não esquecerei: Ansgar, Martin, Alex e Lena pela grande recepção e hospitalidade na Alemanha durante o período sanduíche! *Ich liebe Euch!*
- Agradeço a Profa. Dra. Lucimara S. Roman e ao Prof. Dr. Rodrigo Mossanek pelo excelente trabalho frente à coordenação do programa de pós-graduação em física da UFPR e à secretária Leila Navarro.
- Aos professores Dr. Marcos Gomes E. da Luz, Dr. Rodrigo Mossanek, Dr. José A. de O. Freire, membros da banca de pré-defesa, pelas valiosas sugestões para enriquecer o trabalho. Aos professores Dr. Márcio H. F. Bettega, Dr. Ricardo L. Viana, Dr. Mário J. de Oliveira e Dr. Fernando A. de Oliveira, membros da banca de defesa, pelo aceite, pelas correções e valiosas sugestões.
- À CAPES pelo auxílio financeiro e pelo projeto PROBRAL.
- Ao grupo FISUX pelo suporte computacional. Também ao Prof. Dr. Carlos de Carvalho, Marcos Santos, Alan Celestino e Thiago Prado também pelo suporte computacional.

“Não há assuntos pouco interessantes; apenas há pessoas pouco interessadas.” (G. K. Chesterton)

Resumo

A equação generalizada de Langevin é aplicável a uma variedade de problemas físicos e pode ser derivada de um modelo hamiltoniano que consiste em um sistema acoplado a um banho de osciladores que estão desacoplados entre si. Neste trabalho propusemos um modelo para um banho finito e a tempo discreto. À partir do modelo proposto, derivamos e estudamos o que chamamos de mapa generalizado. Mostramos que o mapa proposto atinge um estado estável através da obtenção de uma forma não usual de relação de flutuação-dissipação. As soluções analíticas para os mapas do banho térmico foram encontradas e mostramos que a dissipação surge naturalmente no sistema proposto. Encontramos a distribuição de equilíbrio para o banho, de maneira a interpretá-lo como um reservatório térmico a uma dada temperatura. Como exemplo, aplicamos o mapa em problemas como a partícula livre, o que caracteriza um movimento browniano e exemplos referentes ao sistema sujeito a um potencial que pode apresentar caos. Conjecturamos que nosso mapa é também aplicável a uma grande variedade de fenômenos físicos onde o ambiente considerado esteja sujeito a impulsos periódicos.

Abstract

The generalized Langevin equation is applicable to a large variety of physical systems and can be obtained from a Hamiltonian microscopic model, which consists of a system coupled to a bath of uncoupled harmonic oscillators. In this work we proposed a model for a discrete time finite bath. Starting from the proposed model we derive a generalized map. Through to a nonusual fluctuation-dissipation relation it is shown that the proposed map reach a stable state. The analytical solutions for the bath maps are obtained and we shown that the dissipation naturally arises in our model. We found the equilibrium distribution for the bath in the sense of a thermal bath, for which we can set a temperature. As an example, we apply the map in problems like free particle, in a Brownian-like motion, and a chaotic system. Further we conjecture that our map are also applicable to a large variety of physical systems, where the environment is subject to periodic kicks.

Sumário

Agradecimentos	iv
Resumo	vi
Abstract	vii
Sumário	viii
1 Introdução	1
2 Os sistemas dinâmicos	6
2.1 A definição de um sistema dinâmico	6
2.2 A estabilidade das órbitas	9
2.3 Os sistemas dinâmicos hamiltonianos	10
2.4 A estrutura simplética e o teorema de Liouville	11
2.5 A análise da dinâmica dos sistemas a tempo discreto	12
3 A equação generalizada de Langevin	19
3.1 O movimento browniano	19
3.2 O sistema imerso em banho de osciladores harmônicos	22
3.3 O tratamento estatístico	27
3.4 A descrição do movimento browniano através de um mapa	31

4	O mapa generalizado	32
4.1	O modelo proposto	32
4.2	O mapa harmônico	36
4.3	O sistema imerso em banho harmônico discreto	42
4.4	A relação de flutuação-dissipação	43
4.5	A influência dos impulsos periódicos no ambiente	49
4.6	A dinâmica de uma partícula livre no ambiente finito com impulsos periódicos	55
5	As simulações numéricas	59
5.1	A densidade espectral do banho	59
5.2	A determinação das condições iniciais	61
5.3	O mapa generalizado e o movimento browniano	63
5.4	O potencial harmônico para o sistema	67
5.4.1	As trocas de energia entre o sistema e o banho	68
5.5	O potencial do tipo catraca	73
6	Conclusões	79
A	O limite $\tau \rightarrow 0$	82
A.1	O mapa original	82
B	O termo de soma: memória e dissipação	85
	Referências Bibliográficas	87

Introdução

A teoria dos sistemas dinâmicos ocupa-se do estudo das propriedades matemáticas de um sistema que modela um problema físico [1–5]. Na prática, estes sistemas podem ser caracterizados por um conjunto de variáveis de estado, que fornecem toda a informação sobre o estado do sistema em um determinado tempo.

Alguns dos problemas físicos conhecidos são tratáveis apenas quando se considera um sistema isolado. Contudo, os processos ditos irreversíveis só são passíveis de investigação se considerarmos um sistema em contato com um banho. Modelos como estes permitem o estudo detalhado das propriedades do banho e auxiliam na compreensão dos processos irreversíveis, bem como a sua origem microscópica.

Os modelos microscópicos usualmente tratam o banho térmico como composto de infinitos osciladores harmônicos desacoplados entre si, porém todos acoplados ao sistema [6–9]. Como consequência, os efeitos do ambiente podem ser inteiramente descritos pela densidade espectral do banho, usualmente denotada por $J(\omega)$ e definida como [10]:

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_i \frac{\Gamma_i^2}{m_i \omega_i} \delta(\omega - \omega_i). \quad (1.1)$$

Um exemplo de problema que é tratado sob esta perspectiva é o complexo de antenas coletoras de luz, presente em alguns tipos de bactéria [11]. Na figura 1.1 é apresentada uma célula que compõe o complexo.

As partes coloridas em verde e amarelo correspondem aos pigmentos responsáveis pela absorção da luz em um processo de fotossíntese. O interesse neste tipo de modelo, para o caso apresentado na figura 1.1, é descrever a influência das flutuações térmicas sobre o sistema central, que interage com os fônons do banho térmico.

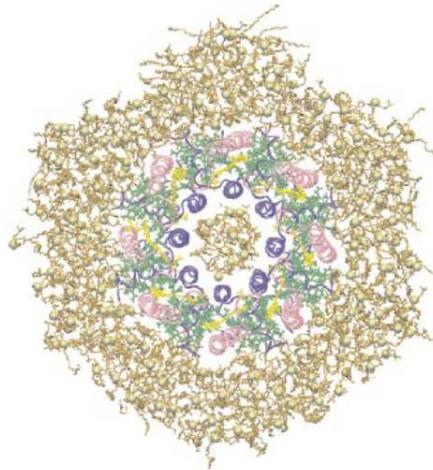


Figura 1.1: Representação esquemática de uma unidade celular do complexo coletor de luz. Esta figura foi extraída da referência [11].

Para o caso do complexo de antenas coletoras de luz a densidade espectral dos fônons é obtida experimentalmente no trabalho [11]. Mostramos esta densidade espectral na figura 1.2.

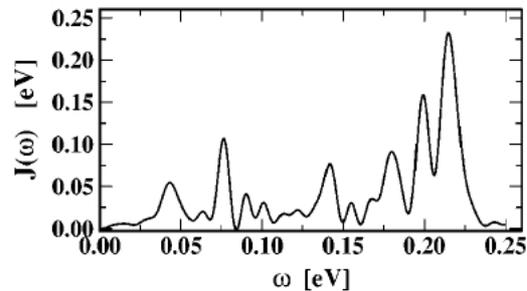


Figura 1.2: A densidade espectral obtida experimentalmente dos fônons que fazem o papel do banho térmico para o caso do complexo de antenas coletoras de luz. Esta figura foi extraída da referência [11].

É interessante notar da figura 1.2, que embora a densidade espectral seja dada por uma função contínua das frequências dos fônons, ω , algumas frequências se destacam nas interações do sistema com o banho.

Com efeito, o problema exposto acima poderia ser naturalmente modelado por um sistema imerso em banho térmico cujo número de osciladores seja finito. Este é o sentido do termo banho estruturado empregado aqui: um banho finito onde apenas algumas frequências são importantes para as interações estudadas.

No caso clássico a tempo contínuo, um modelo microscópico como o do sistema imerso

em banho térmico já foi amplamente estudado, de maneira que, para um acoplamento bilinear fraco nas coordenadas do banho e do sistema, a equação de movimento para o sistema corresponde a chamada equação generalizada de Langevin [6–8]. O termo generalizado se refere ao fato de que as propriedades detalhadas do meio podem ser estudadas em tais modelos, como o papel da memória e dissipação. De fato, vários processos naturais são dependentes de algum fator de memória [12, 13]. Colocada deste modo, a equação inclui os efeitos de memória e ruído, bem como a dissipação induzida pelo banho, algo não considerado - por exemplo - na abordagem de P. Langevin do movimento browniano [14].

A forma geral da equação generalizada de Langevin é escrita como segue [6]:

$$\frac{d^2\vec{r}(t)}{dt^2} + \nabla V(\vec{r}) + \int_0^t \mathcal{K}(t-t')\vec{r}(t')dt' = \vec{\Phi}(t), \quad (1.2)$$

onde $\vec{r}(t)$ é o vetor posição da partícula do sistema no instante t , $\nabla V(\vec{r})$ consiste em uma força externa aplicada no sistema e $\vec{\Phi}(t)$ corresponde a força flutuante. A integral que contém todo o histórico do movimento é chamada integral de memória e a matriz $\mathcal{K}(t-t')$ denota o núcleo de memória dissipativo, que se relaciona com a força flutuante através do teorema da flutuação-dissipação, cuja relação clássica é expressa por [15, 16]:

$$\langle \vec{\Phi}(t) \otimes \vec{\Phi}(t') \rangle = k_B T \mathcal{K}(t-t'), \quad (1.3)$$

sendo k_B a constante de Boltzmann, T a temperatura do meio e $\langle \cdot \rangle$ denotando a média realizada no *ensemble*.

Como um outro exemplo que considera o número finito de constituintes no banho térmico, podemos citar os trabalhos referentes às trocas de energia e efeitos sobre a dinâmica e o transporte de partículas com potencial não-linear, com possível comportamento caótico [17, 18]. Em um outro trabalho, mostrou-se que um número finito de constituintes caóticos pode termalizar e representar um banho térmico a uma dada temperatura [19]. Também foram investigadas propriedades gerais quando mais de um sistema é acoplado a um banho por meio dos modelos microscópicos [20].

Para os sistemas quânticos, a equação generalizada de Langevin também foi derivada e estudada nos trabalhos [6, 21, 22], sendo que o modelo microscópico de Caldeira-Leggett foi inicialmente proposto para o estudo da origem da dissipação e efeitos de tunelamento na mecânica quântica [22].

Nos problemas quânticos, os interesses são variados e, além da dissipação e tunelamen-

tos supracitados, podemos contabilizar o interesse na descoerência e taxas de decaimento de partículas em armadilhas ópticas, onde se considera a abordagem do sistema imerso em banho térmico [10].

Além da importância e variedade de fenômenos que podem ser descritos pela abordagem do sistema imerso em banho térmico, também devemos levar em consideração os problemas onde constantemente as interações variam com o tempo. Por exemplo, em trabalhos recentes, átomos inicialmente preparados em condensado de Bose-Einstein são submetidos a interações pulsadas com “LASERS” [23–26]. Este tipo de interação pode ser modelada através de impulsos periódicos.

Em um outro trabalho, devido aos efeitos gerados pela dinâmica não-linear do ambiente estudado, as interações e o banho finito foram descritos com impulsos periódicos [27, 28].

Os impulsos periódicos aos quais nos referimos podem ser modelados por potenciais que constantemente são ativados e desativados com uma certa periodicidade, dada pelo chamado tempo de “kick” [1, 4, 29]. Matematicamente, isto pode ser feito pela introdução da delta de Dirac juntamente com o potencial na hamiltoniana que descreve o problema. Fisicamente, podemos visualizar que entre os “kicks”, ou impulsos, a partícula de massa m se move livremente, de maneira que o potencial é ativado durante o “kick”. Ao longo desta tese, utilizamos várias vezes o termo impulsos periódicos, ou “kicks”, representando sinônimos. Este procedimento conduz a um sistema dinâmico a tempo discreto, quando as equações de movimento são integradas entre os “kicks” [1–3].

Diante destas considerações, podemos questionar a respeito das propriedades do meio quando o banho é estruturado e cujas interações são representadas por impulsos periódicos. Uma questão que naturalmente se coloca é a respeito dos efeitos, sobre as propriedades clássicas, quando o banho considerado é finito (estruturado) e cujas interações são ligadas e desligadas constantemente. Sem considerar os efeitos do banho térmico, já foi mostrado rigorosamente que se um mapa simplético for definido em um dado espaço \mathcal{S} , então um mapa definido em um subespaço de \mathcal{S} apresenta propriedades semelhantes às da equação de Langevin [30]. Posteriormente, uma discretização do modelo microscópico de Caldeira-Leggett foi proposta sem considerar explicitamente os tempos de “kick” [31] nas variáveis ângulo-ação [32, 33].

Estes desenvolvimentos forneceram uma compreensão a respeito do que se pode obter com a discretização temporal da equação de Langevin. Contudo, ainda resiste a dúvida a respeito da influência de um ambiente formado por sistemas dinâmicos a tempo discreto

e o efeito dos impulsos periódicos - distintos ou não - na dinâmica destes sistemas.

É neste panorama que esta tese é desenvolvida, tendo como ponto de partida o modelo de Caldeira-Leggett efetuando uma conexão com a teoria de sistemas dinâmicos e, mais especificamente os sistemas a tempo discreto.

Propusemos, e estudamos nesta tese um modelo microscópico de banho estruturado, cujas interações são dadas por impulsos periódicos. Derivamos um mapa à partir do modelo proposto, com o objetivo de representar um sistema imerso em banho térmico, cujo acoplamento inicialmente é bilinear nas coordenadas de posição de cada um dos elementos do banho e o sistema. Para isto, neste trabalho efetuamos cálculos analíticos com o auxílio de computação simbólica (como o “software” *Mathematica*) e cálculos numéricos através de programação em linguagem *C*. Fizemos uso de elementos da teoria dos sistemas dinâmicos e da mecânica estatística clássica.

Esta tese está estruturada da seguinte maneira: no Capítulo 2 apresentamos os principais conceitos ligados à teoria dos sistemas dinâmicos, utilizados neste trabalho. Iniciamos pela definição de um sistema dinâmico e discutimos aspectos gerais que serão utilizados ao longo de todos os outros capítulos. Posteriormente, no Capítulo 3, fazemos uma revisão em torno da equação generalizada de Langevin com uma introdução histórica, iniciando pelo movimento browniano e a abordagem do sistema imerso em banho de osciladores harmônicos, resultando na equação generalizada de Langevin. O modelo proposto para o estudo e os resultados analíticos deste trabalho estão descritos no Capítulo 4, onde propomos e estudamos o que chamamos de mapa generalizado. No Capítulo 5 apresentamos a investigação numérica que resulta do mapa generalizado. Finalmente, apresentamos as conclusões e trabalhos futuros no capítulo 6.

Os sistemas dinâmicos

Neste capítulo forneceremos os fundamentos da teoria de sistemas dinâmicos. Iniciaremos pela definição de um sistema dinâmico e, nas seções posteriores, mostraremos como é feita a análise de um sistema dinâmico em termos da estabilidade dos pontos de equilíbrio. Também apresentaremos a definição de um sistema dinâmico hamiltoniano, que será amplamente utilizada ao longo da tese.

2.1 A definição de um sistema dinâmico

A teoria dos sistemas dinâmicos trata dos sistemas matemáticos cujas variáveis de estado se alteram à medida que o tempo evolui. Logo, um sistema dinâmico consiste de uma prescrição, ou seja, uma lei matemática para a evolução temporal das variáveis que caracterizam o estado do sistema. Um sistema dinâmico é expresso da seguinte maneira:

$$\frac{d\vec{r}(t)}{dt} = \vec{\mathcal{F}}(\vec{r}), \quad (2.1)$$

sendo $\vec{r}(t)$ uma função do tempo correspondente ao vetor das variáveis de estado do sistema e $\vec{\mathcal{F}}(\vec{r})$ correspondendo à forma funcional, na forma vetorial, da lei de evolução.

Um sistema dinâmico onde o tempo t flui continuamente, como na equação (2.1), é chamado na literatura de sistema dinâmico a tempo contínuo ou, mais precisamente, um fluxo [1, 2, 4, 5].

Em contrapartida, a teoria dos sistemas dinâmicos também estuda sistemas matemáticos onde o tempo varia discretamente, os mapas [1, 2, 4]. Vários são os motivos para o estudo de um mapa. Uma das razões é o ganho de tempo computacional em investiga-

ções numéricas. O outro motivo é que alguns fenômenos físicos podem ser notavelmente modelados por sistemas a tempo discretos. Mostraremos alguns exemplos ao longo deste capítulo.

Um mapa é expresso matematicamente como segue:

$$\vec{r}_{n+1} = \mathcal{M}(\vec{r}_n), \quad (2.2)$$

sendo agora \vec{r}_n o vetor de estado na iterada n , sendo $n \in \mathbb{Z}$ e $\mathcal{M}(\vec{r}_n)$ a lei de evolução à tempo discreto, expressa na forma matricial.

Como exemplo de um mapa, vamos considerar o problema da dinâmica populacional. Suponhamos que uma dada população inicial de bactérias dobre a cada hora em um ambiente limitado, *i. e.*, que no tempo atual a população seja o dobro do que era há uma hora. Em uma situação como esta, é intuitivo que o número de bactérias não cresce *ad infinitum*, pois há um espaço limitado para isto, além do tempo de vida usual da bactéria [2, 5].

Uma forma de modelar matematicamente a situação supracitada é dada pelo conhecido mapa logístico [1, 2, 5]:

$$x_{n+1} = rx_n(1 - x_n). \quad (2.3)$$

Embora o modelo logístico (a tempo contínuo) para o crescimento populacional tenha sido popularizado por R. May (1936-), foi proposto inicialmente por P. F. Verhulst (1804-1849), em contraposição ao modelo de T. R. Malthus (1766-1834), que admite crescimento populacional exponencial [5].

A expressão (2.3) deve ser vista da seguinte maneira: a cada novo tempo, ou iterada n (com $n \in \mathbb{Z}$), a população é dada pela variável de estado x . Tal prescrição diz como a população de bactérias deve crescer com o passar do tempo, sendo r relacionado com a taxa de natalidade das bactérias.

Diferente de outros modelos populacionais, o mapa logístico (2.3), prevê também o fato de que a população não pode crescer continuamente, devido justamente ao termo logístico $(1 - x_n)$, que está relacionado com a capacidade do ambiente.

Os modelos como o mapa logístico têm grande importância na biologia em problemas como a competição entre espécies. Consideremos a situação em que coelhos e ovelhas competem pelo mesmo recurso em um ambiente limitado. Tal situação pode ser descrita matematicamente com o auxílio de termos logísticos e podemos inferir à partir do estudo destes modelos uma lei já conhecida: que duas espécies distintas competindo pelo mesmo

recurso em um ambiente de capacidade limitada, não podem coexistir [5].

Um mapa pode ser obtido pela discretização temporal de um fluxo. Uma maneira usual de se fazer isto consiste do método das secções de Poincaré. Este método consiste em considerar inicialmente um fluxo cujo espaço de fases é N -dimensional. Posteriormente uma superfície Σ é judiciosamente escolhida de modo que as trajetórias no espaço de fases N -dimensional, interceptem a superfície e o ponto de intersecção seja marcado. Em particular, Poincaré mostrou que todas as propriedades dinâmicas do sistema original são preservadas no mapa. Por exemplo, uma trajetória periódica, dá origem a uma órbita periódica no espaço $(N - 1)$ -dimensional da superfície Σ . A figura 2.1 ilustra a construção das secções de Poincaré.

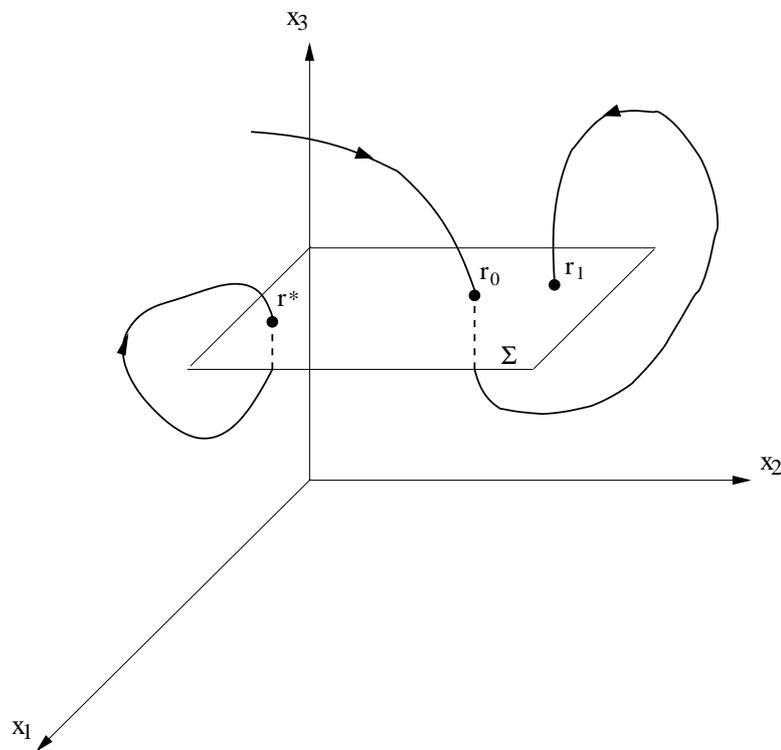


Figura 2.1: Representação da superfície Σ e de trajetórias do sistema contínuo que interceptam a superfície de Poincaré com os respectivos pontos marcados. Note que uma trajetória periódica fechada é marcada como um ponto fixo do mapa.

Os pontos marcados na superfície de Poincaré Σ correspondem à órbita discreta do mapa. Rigorosamente, formam o conjunto $\{\vec{r}_n\}_{n=0}^{n-1}$, sendo n o número de iterações do mapa, e \vec{r}_0 a condição inicial.

2.2 A estabilidade das órbitas

O estudo de um sistema através da teoria de sistema dinâmicos envolve encontrar os pontos de equilíbrio (ou pontos fixos) e conhecer a estabilidade destes pontos.

Como ilustração, consideremos um fluxo dado pela expressão (2.1). Um ponto de equilíbrio para o fluxo consiste de um ponto \vec{r}^* para o qual $\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}^*) = \vec{0}$.

A estabilidade dos pontos de equilíbrio é um conceito local. Isto significa que o interesse é na vizinhança linear dos pontos de equilíbrio. Para tanto, podemos introduzir uma perturbação $\vec{\eta}(t)$ na vizinhança do ponto de equilíbrio e, conseqüentemente, expandirmos em série de Taylor como segue:

$$\begin{aligned}\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}^* + \vec{\eta}) &= \vec{\mathcal{F}}(\vec{r}^*) + D\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}^*) \cdot \vec{\eta} + \mathcal{O}(\eta^2) \\ &\approx D\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}^*) \cdot \vec{\eta},\end{aligned}\tag{2.4}$$

pois $\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}^*) = \vec{0}$.

O termo $D\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}^*)$ corresponde à matriz jacobiana calculada no ponto de equilíbrio \vec{r}^* . Considere um sistema N -dimensional tal que $\vec{r}(t) = [r^{(1)}(t), r^{(2)}(t), \dots, r^{(N)}(t)]$ e também $\vec{\mathcal{F}}(t) = [F^{(1)}(\vec{r}), F^{(2)}(\vec{r}), \dots, F^{(N)}(\vec{r})]$. Logo, a matriz jacobiana fica determinada por:

$$D\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}) \equiv \begin{bmatrix} \frac{\partial F^{(1)}}{\partial r^{(1)}} & \frac{\partial F^{(1)}}{\partial r^{(2)}} & \cdots & \frac{\partial F^{(1)}}{\partial r^{(N)}} \\ \frac{\partial F^{(2)}}{\partial r^{(1)}} & \frac{\partial F^{(2)}}{\partial r^{(2)}} & \cdots & \frac{\partial F^{(2)}}{\partial r^{(N)}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial F^{(N)}}{\partial r^{(1)}} & \frac{\partial F^{(N)}}{\partial r^{(2)}} & \cdots & \frac{\partial F^{(N)}}{\partial r^{(N)}} \end{bmatrix}.\tag{2.5}$$

Como estamos interessados na estabilidade linear, então podemos desprezar os termos quadráticos na perturbação, na equação (2.4), o que conduz ao conjunto de equações linearizadas para a perturbação:

$$\frac{d\vec{\eta}(t)}{dt} = D\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}^*)\vec{\eta}(t).\tag{2.6}$$

Isto conduz ao problema de autovalores e autovetores do tipo $D\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}^*)\vec{v}_j = \Lambda_j\vec{v}_j$, sendo $\{\vec{v}_j\}$ o conjunto dos autovetores da matriz jacobiana e Λ_j o autovalor correspondente ao j -ésimo autovetor.

Quase toda a discussão a respeito da estabilidade dos pontos de equilíbrio em fluxos vale para os mapas, em especial a linearização do sistema e obtenção de informação à partir

dos autovalores da matriz jacobiana. A rigor, para os mapas, os pontos de equilíbrio são denominados pontos fixos. Uma representação pictórica de um ponto fixo para um mapa é dada pelo ponto r^* na figura 2.1.

Consideremos uma aplicação $\vec{r}_n \mapsto \mathcal{M}(\vec{r}_n)$. Um ponto fixo \vec{r}^* para o mapa é um ponto para o qual ocorre: $\mathcal{M}(\vec{r}^*) = \vec{r}^*$. Se voltarmos nossa atenção às secções de Poincaré, veremos que há ainda um outro comportamento possível na transição fluxo-mapa que precisamos distinguir: o das órbitas periódicas, que correspondem às trajetórias contínuas também periódicas.

A definição dos sistemas dinâmicos discretos mostra que a iterada atual depende da iterada anterior. Usualmente a forma funcional da lei de evolução para um mapa é representada como uma função, invertível ou não, que pode ser real. Assim sendo, deve ser óbvio que iterar um mapa significa compor a função com ela mesma. Em outras palavras, dada uma condição inicial \vec{r}_0 com $\mathcal{M}(\vec{r}_n)$ sendo a forma funcional do mapa, então podemos definir a n -ésima iterada do mapa como sendo:

$$\vec{r}_n = \mathcal{M}^{[n]}(\vec{r}_0), \quad (2.7)$$

o que nos conduz à definição de uma órbita periódica de período p : consiste dos pontos formados pelo conjunto $\{\vec{r}_i\}_{i=0}^{p-1}$ desde que $\vec{r}_p = \vec{r}_0$. Nos termos da definição (2.7), podemos expressar um ponto de período p como sendo:

$$\vec{r}_p = \mathcal{M}^{[p]}(\vec{r}_0). \quad (2.8)$$

2.3 Os sistemas dinâmicos hamiltonianos

Os sistemas hamiltonianos são caracterizados por uma variedade de dimensão par, chamado espaço de fases, uma estrutura simplética e uma função sobre esta variedade, que é denominada de hamiltoniana. Tal função fornece toda a informação do problema de interesse. Em particular, as equações de movimento associadas ao problema estudado são inteiramente determinadas pelas equações canônicas, ou de Hamilton.

Chamamos de espaço de fases o espaço matemático formado pelas variáveis de estado do sistema. No caso dos sistemas hamiltonianos, se q e p forem as coordenadas de posição e momentum generalizados, respectivamente, então um ponto (p, q) neste espaço especifica um estado do sistema.

A função hamiltoniana é proveniente do Princípio da Mínima Ação (ou Princípio de

Hamilton) e as equações de movimento do sistema podem ser obtidas inteiramente com o conhecimento de tal função.

Considere uma função hamiltoniana $H(p, q, t)$, como sendo função da posição q , do momentum p e do tempo t . As equações de movimento, ou de Hamilton, são dadas por:

$$\frac{dp(t)}{dt} = -\frac{\partial H(p, q, t)}{\partial q}, \quad (2.9)$$

$$\frac{dq(t)}{dt} = \frac{\partial H(p, q, t)}{\partial p}. \quad (2.10)$$

Para um sistema autônomo, *i. e.*, onde $H(p, q)$ não apresenta dependência temporal explícita, temos:

$$\begin{aligned} \frac{dH(p, q)}{dt} &= \frac{dq(t)}{dt} \frac{\partial H(p, q)}{\partial q} + \frac{dp(t)}{dt} \frac{\partial H(p, q)}{\partial p}, \\ &= -\frac{dq(t)}{dt} \frac{dp(t)}{dt} + \frac{dp(t)}{dt} \frac{dq(t)}{dt}, \end{aligned} \quad (2.11)$$

$$\frac{dH(p, q)}{dt} = 0. \quad (2.12)$$

Se pudermos identificar a função hamiltoniana como sendo a energia total do sistema, então a expressão (2.12) corresponde ao Princípio da Conservação da Energia.

Diante disto, podemos agora discutir as propriedades fundamentais de tais sistemas.

2.4 A estrutura simplética e o teorema de Liouville

Os sistemas hamiltonianos constituem uma classe restrita de sistemas físicos. Há uma estrutura definida sobre o espaço de fases, chamada estrutura simplética, conforme comentamos na seção 2.3. Para compreender como se define esta estrutura, considere que $\vec{r} = (P, X)$ é um vetor no espaço de fases e que a equação de movimento associada é dada por:

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{\mathcal{F}}(\vec{r}). \quad (2.13)$$

Considere também que a função $\vec{\mathcal{F}}(\vec{r})$ admite a seguinte forma:

$$\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}) = J \begin{bmatrix} \frac{\partial H(p, q)}{\partial p} \\ \frac{\partial H(p, q)}{\partial q} \end{bmatrix}, \quad (2.14)$$

sendo

$$J = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

e também utilizamos a seguinte notação

$$\frac{\partial H(p, q)}{\partial r} = \begin{pmatrix} \partial H(p, q)/\partial p \\ \partial H(p, q)/\partial q \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Consequentemente, todo sistema que pode ser escrito na forma (2.13) com $\vec{\mathcal{F}}(\vec{r})$ obedecendo (2.14) é dito simplético.

Uma das propriedades mais importantes associadas aos sistemas hamiltonianos é o fato do sistema preservar o volume no espaço de fases. Este resultado corresponde ao teorema de Liouville e é uma consequência de transformações simpléticas, as quais não entraremos em detalhes. Por ora, cabe comentarmos que em uma transformação simplética, o determinante da matriz jacobiana associada ao sistema é sempre igual a unidade.

Em resumo, o teorema de Liouville afirma que a nuvem de pontos representativos, constituídos pelas condições iniciais, se move como um fluido incompressível, onde o volume da nuvem permanece constante.

2.5 A análise da dinâmica dos sistemas a tempo discreto

Iniciamos este capítulo com a definição de um sistema dinâmico na seção 2.1. Também naquela seção apresentamos as seções de Poincaré. Uma forma prática de efetuar a discretização no sentido de Poincaré consiste em substituir os termos de potencial em uma função hamiltoniana pela inserção de impulsos periódicos. Vamos abrir esta seção descrevendo em detalhes a discretização para um sistema hamiltoniano, fato que será amplamente utilizado neste trabalho.

Para efetuarmos este procedimento, iniciamos pela função hamiltoniana $H(p, x, t)$ onde inserimos termos de impulsos periódicos, usualmente chamados “kicks”, no termo de potencial. Isto equivale a sistemas físicos cujo potencial é “ligado” e “desligado” em instantes de tempo regulares:

$$H(p, x, t) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \sum_{n=0}^{\infty} \delta\left(\frac{t}{\tau} - n\right). \quad (2.17)$$

As equações de Hamilton (2.9) e (2.10) são escritas como seguem para o sistema (2.17):

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial V(x)}{\partial x} \sum_{n=0}^{\infty} \delta\left(\frac{t}{\tau} - n\right), \quad (2.18)$$

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m}, \quad (2.19)$$

sendo m a massa do sistema.

Entre os impulsos, *i. e.*, $n < t/\tau < n+1$, e o momentum permanece constante, sendo que a posição varia como:

$$\begin{aligned} x(n\tau + \epsilon) &= x(n\tau) + \frac{\tau}{m} p(n\tau + \epsilon), \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{\tau}{m} p_{n+1}, \end{aligned} \quad (2.20)$$

sendo $\epsilon \in \mathbb{R}$ pequeno e onde adotamos a notação $x(n\tau + \epsilon) \rightarrow x_{n+1}$ e $x(n\tau) = x_n$. Em outras palavras, tomamos um ϵ pequeno para denotar o fato de que avaliamos a variável no instante imediatamente após o “kick”.

Para obtermos uma expressão de recorrência também para o momentum, analisamos dois instantes entre um “kick”: imediatamente antes e imediatamente depois. Deste modo, podemos integrar entre os “kicks”:

$$\begin{aligned} \int_{n\tau-\epsilon}^{n\tau+\epsilon} \left[\dot{p} + V'(x) \delta\left(\frac{t}{\tau} - n\right) \right] dt &= 0 \\ p(n\tau + \epsilon) - p(n\tau - \epsilon) + V'(x_n)\tau &= 0. \end{aligned}$$

Consequentemente:

$$p_{n+1} = p_n - \tau \frac{\partial V(x)}{\partial x} \Big|_{x=x_n}, \quad (2.21)$$

no limite $\epsilon \rightarrow 0$, onde utilizamos a notação $p(n\tau + \epsilon) = p_{n+1}$ e $p(n\tau - \epsilon) = p_n$. Também fizemos $V'(x) = \frac{\partial V(x)}{\partial x}$ e $\dot{p} = \frac{dp(t)}{dt}$.

O conjunto de relações de recorrência (2.21) e (2.20) constituem um mapa que apresenta estrutura simplética. Trata-se de um sistema dinâmico a tempo discreto hamiltoniano. De fato, é possível demonstrar de maneira geral o resultado obtido: dado um sistema hamiltoniano com impulsos periódicos a tempo τ , então a sua discretização fica

inteiramente determinada por [29]:

$$\vec{p}_{n+1} = \vec{p}_n - \tau \nabla V(\vec{x}_n), \quad (2.22)$$

$$\vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n + \frac{\tau}{m} \vec{p}_{n+1}, \quad (2.23)$$

com $\nabla V(\vec{x}_n)$ denotando o gradiente do potencial.

Uma análise da estabilidade linear de um sistema dinâmico a tempo discreto consiste inicialmente em encontrar os pontos fixos do mapa. Posteriormente, a matriz jacobiana nos pontos fixos é calculada e, então, os autovalores e autovetores fornecem informações a respeito da estabilidade de tais pontos.

Conforme comentamos na seção 2.1, um ponto fixo do mapa pode ser classificado quanto a sua estabilidade como sendo estável ou instável. Também mostramos qualitativamente que estas informações são extraídas do sistema linearizado, o que, em outras palavras, remete a um problema de autovalores e autovetores.

Vamos considerar um mapa hamiltoniano bidimensional para fins ilustrativos. Assim, das expressões (2.22) e (2.23), obtém-se o mapa com momentum dado pela equação (2.21) e posição (2.20). Um sistema dinâmico para o qual $V'(x_n) = \frac{\kappa}{2\pi} \sin(2\pi x_n)$, limitando o espaço de fases para $[0, 1)$ nas duas variáveis, é conhecido como o mapa padrão¹ [34]. Após a proposição deste mapa, muitos sistemas físicos que podiam ser modelados por este sistema foram descobertos. Um exemplo é o chamado rotor pulsado, que consiste de uma barra, livre da ação gravitacional, presa por uma extremidade sendo que a outra extremidade é livre, a qual é sujeita a impulsos periódicos [1].

O mapa padrão é expresso por:

$$p_{n+1} = p_n - \frac{\kappa}{2\pi} \sin(2\pi x_n) \pmod{1}, \quad (2.24)$$

$$x_{n+1} = x_n + p_{n+1} \pmod{1}, \quad (2.25)$$

proveniente da hamiltoniana dada por

$$H(p, q, t) = \frac{p^2}{2} + \frac{\kappa}{2\pi} \cos(2\pi x_n) \sum_{n=0}^{\infty} \delta\left(\frac{t}{\tau} - n\right). \quad (2.26)$$

Outra aplicação do mapa padrão é no acoplamento de vários mapas do tipo (2.24) e (2.25), o que pode ser utilizado para o estudo de confinamento de plasmas em tokamaks

¹Proposto inicialmente por B. V. Chirikov (1976) este mapa leva o nome de padrão por ser um paradigma de um mapa hamiltoniano que pode apresentar caos.

[35].

Também podemos citar como exemplo de aplicação da versão quantizada do mapa padrão, os trabalhos experimentais com átomos frios inicialmente preparados em um condensado de Bose-Einstein [23–26]. Nestes experimentos, uma amostra de átomos frios interage com a onda estacionária de um “LASER”, cuja frequência é ω_L . Uma ilustração de um sistema de dois níveis, tratável pelo modelo descrito em [25] é mostrado na figura 2.2. A frequência de ressonância do sistema quântico é ω_0 .

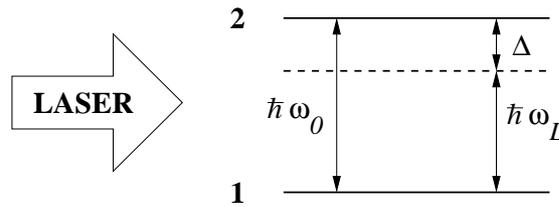


Figura 2.2: Um sistema de dois níveis de energia. A dessintonia corresponde à diferença entre a frequência do sistema quântico e do “LASER”.

Os átomos no condensado de Bose-Einstein são sujeitos a “kicks” periódicos devido à dessintonia do “LASER”. A dessintonia corresponde justamente à diferença entre a frequência de ressonância do sistema quântico e a frequência do “LASER”. Conseqüentemente, $\Delta \equiv \hbar(\omega_0 - \omega_L) \neq 0$. O “LASER” é pulsado com período τ e devido a dessintonia, a dinâmica toda dos átomos fica inteiramente determinada pelo operador hamiltoniano:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} - \kappa \cos \hat{x} \sum_{n=0}^{\infty} \delta \left(\frac{t}{\tau} - n \right), \quad (2.27)$$

que é a versão quantizada do rotor pulsado. A constante κ no rotor pulsado clássico (2.26) corresponde à intensidade do torque aplicado à barra fixa por uma extremidade. No caso quântico (2.27), o parâmetro de não-linearidade depende da “dessintonia” Δ e do tempo de “kick” do “LASER”: $\kappa \propto \Omega_{\text{efetiva}} \tau$, sendo que a frequência efetiva é definida por $\Omega_{\text{efetiva}} = \Omega^2 / \Delta$. A frequência Ω corresponde à frequência de Rabi, que caracteriza o acoplamento radiação-matéria. Este tipo de modelo pode ainda apresentar um tipo de comportamento bastante peculiar, que é chamado caótico.

Para a análise de um sistema dinâmico, além de encontrar os pontos fixos e sua estabilidade, é usualmente efetuado o estudo numérico de quantidades extremamente importantes na caracterização dos sistemas de interesse. Uma destas quantidades intimamente ligadas com a estabilidade dos pontos consiste dos expoentes de Lyapunov [1, 2, 5, 36]. Neste sentido é possível afirmar, pelo conhecimento dos expoentes de Lyapunov, que consistem de uma medida do afastamento de trajetórias com condições iniciais próximas, se

o sistema pode apresentar um dos sintomas do caos. Esta característica é chamada de dependência sensível às condições iniciais. Cabe ressaltar que este tipo de comportamento aparece somente em sistemas determinísticos.

Outro aspecto importante que deve ser levado em consideração para afirmar se há comportamento caótico em um sistema é garantir que o espaço de fases acessível às órbitas seja limitado. A dependência sensível às condições iniciais, que é um diagnóstico para sistemas que apresentam caos, leva à divergência exponencial de duas condições iniciais próximas. Logo, se não garantirmos que o espaço de fases acessível seja limitado, teremos divergência exponencial mesmo em um sistema linear, como por exemplo o sistema seguinte:

$$\frac{dx}{dt} = ax, \quad (2.28)$$

com $x = x(t)$ e $a > 0$. Este sistema corresponde a um sistema dinâmico linear. Seja $\delta x(0) \equiv x^{(1)}(0) - x^{(2)}(0)$ a diferença entre duas condições iniciais 1 e 2, distintas. Esta diferença evoluída de acordo com a lei (2.28) fornecerá:

$$\begin{aligned} \frac{d\delta x(t)}{dt} &= a\delta x(t), \\ \delta x(t) &= e^{a(t-t_0)}. \end{aligned} \quad (2.29)$$

A diferença entre trajetórias com condições iniciais próximas no sistema (2.28) irá divergir exponencialmente, embora não se trate de um sistema dinâmico caótico.

A condição de limitação para o espaço de fases implica que devemos ter um fluxo bidimensional não-autônomo ou um mapa unidimensional não-invertível para que possa existir caos. De fato, o teorema de Poincaré-Bendixson afirma que em fluxos bidimensionais só podem existir pontos de equilíbrio e/ou ciclos-limite e nenhuma trajetória caótica ocorre [4, 5, 37].

Para mensurar esta divergência exponencial são empregados os expoentes de Lyapunov, definidos pelo logaritmo dos autovalores do produto da matriz jacobiana em cada ponto, o que corresponde na prática às iterações de um mapa, no caso discreto. Deste modo, se \vec{v}_j corresponder ao j -ésimo autovetor, então o j -ésimo expoente de Lyapunov é definido como a norma do produto da matriz jacobiana com o j -ésimo autovetor:

$$h_j = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \|D\mathcal{M}^{[n]} \cdot \vec{v}_j\|, \quad (2.30)$$

o que corresponde ao logaritmo dos autovalores.

Consequentemente, para um sistema N -dimensional, teremos N expoentes de Lyapunov, associados com a expansão e contração de uma região de condições iniciais sob a ação do mapa \mathcal{M} , no caso discreto. Deste modo, para um sistema unidimensional, como o mapa logístico, haverá somente um expoente de Lyapunov. Um sistema dinâmico apresentará caos, nas condições já descritas acima, se pelo menos um dos expoentes de Lyapunov for positivo. Para os sistemas hamiltonianos, como se trata de um espaço de fases conjugado com dimensão $2N$, então existirão $2N$ expoentes de Lyapunov e é possível demonstrar, à partir da estrutura simplética, que estes expoentes ocorrem sempre aos pares, isto é: $\sum_i h_i = 0$. Se $\sum_i h_i < 0$, então o sistema é dissipativo, pois há contração de volume no espaço de fases.

Considerando um sistema unidimensional, o expoente de Lyapunov associado a uma trajetória fica inteiramente definido pela soma dos logaritmos:

$$h = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} \ln |D\mathcal{M}(x_i)|, \quad (2.31)$$

com $D\mathcal{M}(x_i)$ denotando a derivada do mapa no ponto $x = x_i$ da trajetória.

Além dos expoentes de Lyapunov, podemos obter um panorama global do sistema dependente de um ou mais parâmetros através de um espaço de parâmetros. No caso de um mapa definido a um parâmetro, podemos fazer uso do diagrama de bifurcação. O expoente de Lyapunov e o diagrama de bifurcação para o mapa logístico são mostrados na figura 2.3

Na figura 2.3 é possível verificarmos a transição para o caos. Para $0 \leq r \leq 3$, a solução converge para um ponto fixo que muda de posição com o aumento do parâmetro. Em $r \approx 3,1$ surge a primeira bifurcação: x_n converge para um órbita de período 2. Embora ocorra a duplicação do período, a solução que era estável antes não deixa de existir: a sua estabilidade é alterada, e passa a ser uma solução instável. Finalmente para $r > 3,5$ há o surgimento da região caótica, em razão das infinitas órbitas instáveis imersas no atrator. Deste modo, o expoente de Lyapunov correspondente passa a ser positivo: há tantas órbitas instáveis que quaisquer condições iniciais próximas divergem.

Feita esta introdução teórica a respeito dos aspectos principais da teoria dos sistemas dinâmicos, vamos estudar um sistema dinâmico a tempo contínuo, a equação de Langevin e, posteriormente, o sistema dinâmico a tempo discreto proposto nesta tese.

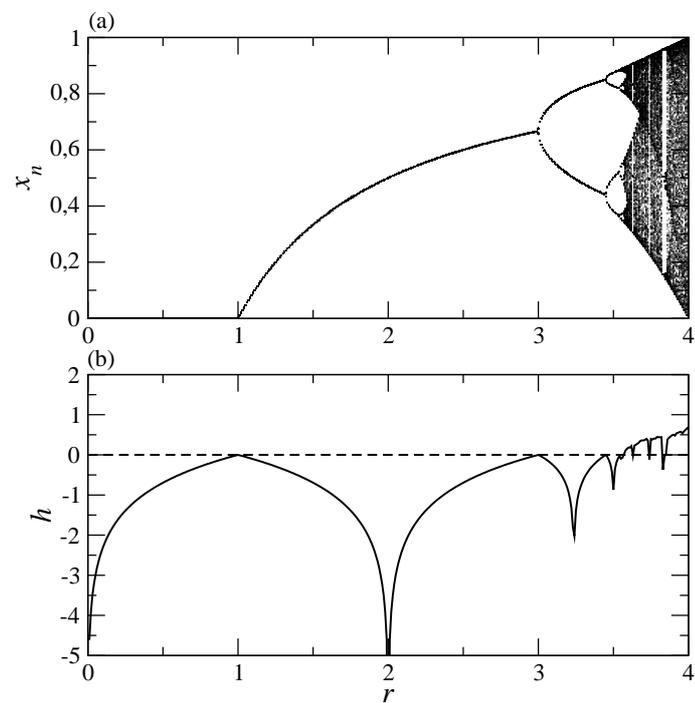


Figura 2.3: (a) O diagrama de bifurcações para o mapa logístico, dado pela solução em função do parâmetro de controle. (b) O corresponde valor do expoente de Lyapunov também em função do parâmetro.

A equação generalizada de Langevin

Vamos tratar neste capítulo da derivação da equação generalizada de Langevin através de um modelo microscópico. Para isto, apresentaremos um tratamento histórico que se inicia pela investigação do movimento browniano, que possibilitou o desenvolvimento da equação de Langevin.

3.1 O movimento browniano

Um fato bastante conhecido e descrito na literatura é a observação experimental do movimento conhecido como browniano. Em 1827, o botânico inglês R. Brown (1773-1858) observou que pequenos grãos de pólen suspensos na água experimentavam um movimento bastante irregular, semelhante ao descrito na figura 3.1.

Anteriormente às observações de R. Brown, pensava-se que o movimento era devido a “seres vivos”, hipótese esta que não se confirmou, em razão do mesmo movimento ser observado para partículas inorgânicas. Contudo, o próprio Brown ressaltou em seu artigo que a sua observação não era a primeira a respeito [38].

Alguns físicos contemporâneos de Brown, como E. Mach (1838-1916), apresentavam críticas em relação a existência dos átomos, pela carência de evidências a respeito [39]. O jesuíta J. Delsaux, em 1877, forneceu a explicação correta do movimento browniano, atribuindo o efeito às colisões das moléculas da água com a partícula suspensa. Era uma evidência em favor da existência dos átomos. Desenvolvimentos posteriores auxiliaram imensamente na explicação deste curioso fenômeno.

A primeira descrição matemática do movimento browniano foi proposta por W. Suther-

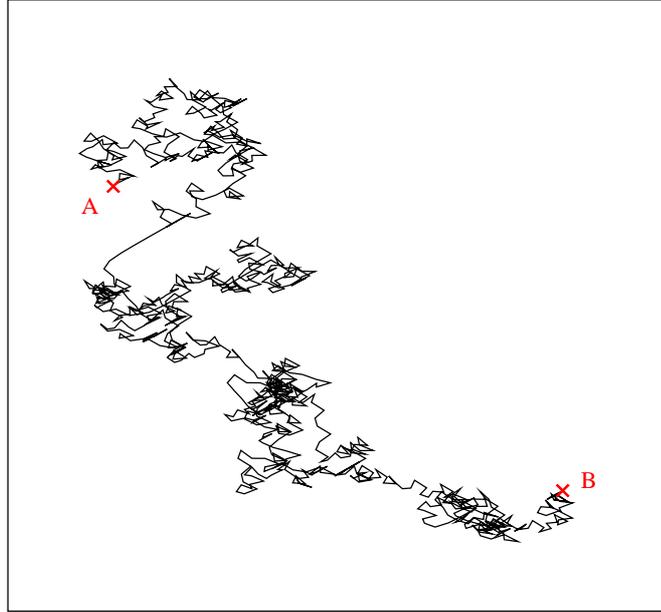


Figura 3.1: Trajetória simulada computacionalmente de uma partícula browniana que vai do ponto A até o ponto B , marcados na figura com um X .

land (1859-1911), A. Einstein (1879-1955) e M. Smoluchowski (1872-1917) de maneira independente. No trabalho de Einstein, a descrição do movimento assentava-se sobre duas proposições: a de que um conjunto de partículas brownianas deve realizar um movimento independente umas das outras e a da independência do estado de uma partícula em relação aos estados anteriores [40].

Se considerarmos que o movimento limita-se a uma dimensão, então podemos escrever a fração de partículas que se desloca entre x e $x + \delta x$ em um dado intervalo de tempo δt [41]:

$$\frac{dN}{N} = \rho(\delta x)d\delta x, \quad (3.1)$$

sendo $\rho(\delta x)$ a distribuição da variável δx normalizada.

O número de partículas por unidade de comprimento, $\eta(x, t)$, entre x e $x + \delta x$ no instante $t + \delta t$ é, então,

$$\eta(x, t + \delta t)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \eta(x + \delta x)\rho(\delta x)d\delta xdx. \quad (3.2)$$

Devido ao fato de que, tanto δt quanto δx são pequenos (para englobar as condições de independência comentadas anteriormente), é possível expandir $\eta(x, t + \delta t)$ e $\eta(x + \delta x)$

até termos de primeira ordem, de maneira que a expressão resultante seja:

$$\frac{\partial \eta(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \eta(x, t)}{\partial x^2}, \quad (3.3)$$

sendo que

$$D = \frac{1}{\delta t} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta x^2}{2} \rho(\delta x) d\delta x. \quad (3.4)$$

Uma equação do tipo (3.3) já era conhecida como uma equação de difusão, sendo D o coeficiente de difusão, embora Sutherland e Einstein tenham sido os primeiros a derivá-la para o problema da partícula browniana.

Uma descrição matemática mais simples do que a proposta por Einstein, é a do físico francês Paul Langevin (1872-1946). A vantagem da descrição de Langevin, em comparação com a de Einstein, é o emprego da segunda lei de Newton, associada com a hipótese da equipartição da energia. Considere uma partícula de massa M imersa em um líquido. A influência do meio sobre a partícula browniana pode ser decomposta em duas partes. Primeiro uma força de viscosidade, proporcional ao momentum da partícula em suspensão e, segundo, uma força estocástica expressa por $F(t)$. Deste modo, a segunda lei de Newton é escrita como segue:

$$\frac{dP}{dt} = -\lambda P + F(t), \quad (3.5)$$

sendo $P = P(t) = MV(t)$ o momentum da partícula, $-\lambda P$ o termo associado à dissipação, em razão das forças viscosas, e $F(t)$ a força aleatória. É necessário um pouco mais de atenção ao conjunto de todas as forças $F(t)$ no tempo $t > 0$: o efeito médio de todas as realizações é nulo, representando uma homogeneidade no efeito das colisões da partícula com as moléculas do líquido. Uma outra hipótese assumida por Langevin foi que tais colisões são independentes, de modo que a autocorrelação entre as forças em tempos distintos seja delta correlacionada. A média no *ensemble*, desta forma, deverá resultar em:

$$\langle F(t) \rangle = 0, \quad (3.6)$$

$$\langle F(t)F(t') \rangle = C\delta(t - t'), \quad (3.7)$$

sendo a constante $C = 2\lambda k_B T$ determinada com o auxílio de resultado proveniente da teoria cinética dos gases, onde k_B corresponde à constante de Boltzmann e T à temperatura.

A expressão (3.7) equivale a tomar para $F(t)$ uma distribuição estocástica, de forma que esta corresponda a um ruído branco¹. Na prática, ao escolhermos forças que correspondam à (3.6) e (3.7), dizemos que o processo de interação é markoviano, pois não depende dos estados anteriores. Em outras palavras, não apresenta efeitos de memória, o que está de acordo com as duas proposições de Einstein descritas anteriormente.

Embora o movimento browniano seja muito bem descrito pela abordagem de Langevin, ainda há questões que devem ser consideradas. Quando as forças $F(t)$ são escolhidas de modo que o processo seja markoviano, alguns detalhes específicos do meio são inacessíveis. Na seção seguinte discutiremos como incluir explicitamente as propriedades do meio.

3.2 O sistema imerso em banho de osciladores harmônicos

Uma característica da descrição de Langevin, apresentada na seção anterior, é que, evidentemente, não se tem uma forma funcional para as forças $F(t)$ que atuam na partícula em suspensão. Por outro lado, outras questões passaram a fazer parte de problemas relacionados com o movimento browniano. Uma delas, e talvez a mais proeminente, é se há alguma conexão de fato microscópica das forças viscosas com a força estocástica. Outra questão que aparece é sobre o efeito da memória das colisões ocorridas.

Uma maneira de representar o líquido no qual a partícula está suspensa é considerar o fluido como um reservatório sendo constituído por N osciladores harmônicos desacoplados entre si, cada qual com frequência de oscilação ω_i , para $i = 1, 2, \dots, N$. Este modelo foi inicialmente proposto no contexto do estudo da dissipação em sistemas quânticos, bem como de problemas de tunelamento [10, 22]. A rigor, os efeitos de dissipação podem ser amplamente estudados em sistemas abertos, onde se considera um ambiente externo acoplado ao sistema.

Com efeito, a forma de se fazer isto é por meio do modelo de Caldeira-Leggett, descrito pela hamiltoniana [22]:

$$H = \frac{P^2}{2M} + V(X) + \sum_{i=1}^N \left[\left(\frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{m_i \omega_i^2}{2} x_i^2 \right) - \Gamma_i X \varphi(x_i) \right]. \quad (3.8)$$

As letras maiúsculas da hamiltoniana (3.8) correspondem às variáveis e parâmetros

¹O ruído é dito branco quando a transformada de Fourier da função de autocorrelação é independente da frequência. Neste caso, considere $t - t' = T$. Logo: $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega T} K_0 \delta(T) dT = K_0$, sendo K_0 constante.

do sistema ao passo que as letras minúsculas denotam as variáveis do banho. O par conjugado posição-momentum da partícula do sistema é (X, P) , enquanto (x_i, p_i) é o par conjugado posição-momentum do i -ésimo oscilador do banho, sendo $i = 1, 2, \dots, N$. A partícula do sistema possui massa M e os N osciladores do banho apresentam, cada um, massa m_i e frequência ω_i . O termo responsável pela interação é dado por $\sum_i \Gamma_i X \varphi(x_i)$, sendo Γ_i o parâmetro de acoplamento entre o sistema e o i -ésimo oscilador e $\varphi(x_i)$ é uma função da coordenada dos osciladores.

A situação modelada pela função hamiltoniana (3.8) está representada na figura 3.2.

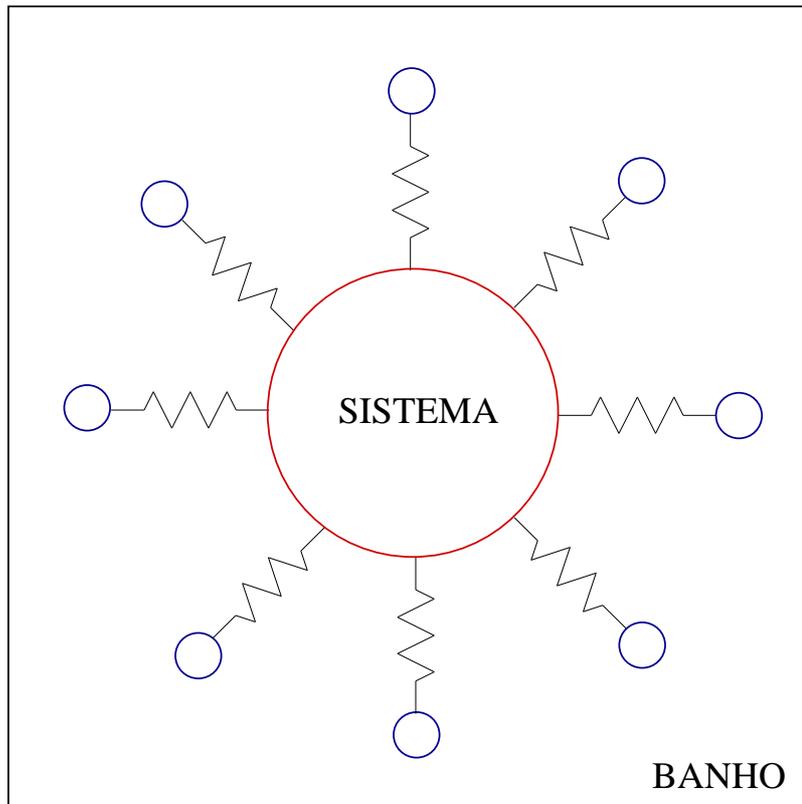


Figura 3.2: Uma representação pictórica da situação modelada pela hamiltoniana 3.8. Nesta situação o banho térmico é constituído por $N = 8$ osciladores harmônicos (azul) e o sistema (vermelho) corresponde a uma partícula sujeita a um potencial $V(X)$.

Na figura 3.2, o reservatório térmico é constituído por N osciladores harmônicos, representados pelos círculos azuis e o sistema é representado pelo círculo vermelho maior. É importante ressaltar que neste modelo as interações se dão apenas entre sistema e oscilador individualmente, e cada oscilador não é interagente de maneira explícita com os demais. As interações são representadas pelas conexões entre banho e sistema e o tamanho das linhas representa, pictoricamente, a intensidade do acoplamento sistema-oscilador, Γ_i .

Neste modelo, é usual considerar o acoplamento entre sistema e cada um dos oscila-

dores como sendo linear na posição de cada um dos osciladores do banho e da posição do sistema, *i. e.*, $\Phi(x_i) = x_i$.

As equações de Hamilton para (3.8), com $\varphi(x_i) = x_i$ (acoplamento bilinear), fornecem:

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{\partial V(X)}{\partial X} + \sum_{i=1}^N \Gamma_i x_i \quad (3.9)$$

$$\frac{dX}{dt} = \frac{P}{M} \quad (3.10)$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -m_i \omega_i^2 x_i + \Gamma_i X \quad (3.11)$$

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{p_i}{m_i}. \quad (3.12)$$

A forma de abordar este problema é estudar o comportamento coletivo à partir da solução das equações do banho. Com a finalidade de obtermos a solução da posição de cada oscilador do banho em função do tempo, podemos empregar a transformação de Laplace.

Após combinarmos as equações (3.11) e (3.12), temos a equação de movimento em $x_i(t)$ para o banho:

$$m_i \ddot{x}_i(t) + m_i \omega_i^2 x_i(t) - \Gamma_i X(t) = 0, \quad (3.13)$$

onde empregamos a notação $\dot{x}(t) = \frac{dx(t)}{dt}$ para a derivada.

A transformada de Laplace é definida como sendo:

$$\mathcal{L}\{f(t)\} \equiv \int_0^{\infty} f(t) e^{-st} dt, \quad (3.14)$$

Tomando a transformada de Laplace de ambos os lados da equação de movimento (3.13), resulta em:

$$m_i \mathcal{L}\{\ddot{x}_i(t)\} + m_i \omega_i^2 \mathcal{L}\{x_i(t)\} - \Gamma_i \mathcal{L}\{X(t)\} = 0. \quad (3.15)$$

Decorre da definição da transformada de Laplace a propriedade:

$$\mathcal{L}\{f^{(l)}(t)\} = s^l \mathcal{L}\{f(t)\} - \sum_{j=1}^l s^{(l-j)} f^{(j-1)}(0), \quad (3.16)$$

sendo aqui l a ordem da derivada e $f(t)$ uma função qualquer do tempo, l vezes derivável.

Considerando que a ordem da derivada é $l = 2$ na equação (3.15), vem:

$$\begin{aligned} m_i [s^2 \mathcal{L}\{x_i(t)\} - sx_i(0) - \dot{x}_i(0)] + m_i \omega_i^2 \mathcal{L}\{x_i(t)\} - \Gamma_i \mathcal{L}\{X(t)\} &= 0, \\ (s^2 + \omega_i^2) \mathcal{L}\{x_i(t)\} - sx_i(0) - \dot{x}_i(0) - \frac{\Gamma_i}{m_i} \mathcal{L}\{X(t)\} &= 0, \\ \mathcal{L}\{x_i(t)\} - \frac{s}{s^2 + \omega_i^2} x_i(0) - \frac{1}{s^2 + \omega_i^2} \dot{x}_i(0) - \frac{\Gamma_i}{m_i(s^2 + \omega_i^2)} \mathcal{L}\{X(t)\} &= 0. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Tomando a transformada de Laplace inversa da expressão (3.17), obtemos:

$$\mathcal{L}^{-1} [\mathcal{L}\{x_i(t)\}] - \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{s}{s^2 + \omega_i^2} \right] x_i(0) - \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{1}{s^2 + \omega_i^2} \right] \dot{x}_i(0) - \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{1}{s^2 + \omega_i^2} \frac{\Gamma_i}{m_i} \mathcal{L}\{X(t)\} \right] = 0.$$

Resulta disto que:

$$x_i(t) = x_i(0) \cos(\omega_i t) + \frac{\text{sen}(\omega_i t)}{m_i \omega_i} p_i(0) + \frac{\Gamma_i}{m_i \omega_i} \int_0^t X(s) \text{sen}[\omega_i(t-s)] ds. \quad (3.18)$$

O terceiro termo do lado direito da equação (3.18) é definida e contém todo o histórico desde a condição inicial até o tempo t . Em nenhum momento assumimos ser o processo markoviano, de modo que não contivesse termos de memória para tempos suficientemente longos.

Podemos estudar com mais detalhes a solução (3.18), quando substituída na expressão (3.9), se resolvermos a integral que aparece em (3.18) por partes:

$$\int_0^t \text{sen}[\omega_i(t-s)] X(s) ds = \frac{X(t)}{\omega_i} - \frac{\cos(\omega_i t)}{\omega_i} X(0) - \int_0^t \frac{\cos[\omega_i(t-s)]}{\omega_i} \dot{X}(s) ds. \quad (3.19)$$

A substituição da integral (3.19) na solução do banho (3.18) conduz à:

$$\begin{aligned} x_i(t) &= x_i(0) \cos(\omega_i t) + \frac{\text{sen}(\omega_i t)}{m_i \omega_i} p_i(0) + \frac{\Gamma_i}{m_i \omega_i^2} X(t) \\ &\quad - \frac{\Gamma_i}{m_i \omega_i^2} X(0) \cos(\omega_i t) - \frac{\Gamma_i}{m_i \omega_i^2} \int_0^t \cos[\omega_i(t-s)] \dot{X}(s) ds. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Levando a equação (3.20) na equação (3.9), resulta:

$$\begin{aligned} \frac{dP}{dt} &= -\frac{\partial V(X)}{\partial X} + \sum_{i=1}^N \Gamma_i \left[x_i(0) \cos(\omega_i t) + p_i(0) \frac{\text{sen}(\omega_i t)}{m_i \omega_i} \right] \\ &+ \sum_{i=1}^N \Gamma_i \left[\frac{\Gamma_i}{m_i \omega_i^2} X(t) - \frac{\Gamma_i}{m_i \omega_i^2} X(0) \cos(\omega_i t) \right] \\ &- \sum_{i=1}^N \frac{\Gamma_i^2}{m_i \omega_i^2} \int_0^t \cos[\omega_i(t-s)] \dot{X}(s) ds. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Podemos reescrever a equação de movimento (3.21) ao separarmos termos associados somente ao banho e o termo que contém todo o histórico da partícula do sistema. Procedendo deste modo e efetuando a troca $s = t'$, ficamos com:

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{\partial V_{\text{efetivo}}(X)}{\partial X} + F(t) - \int_0^t K(t-t') \dot{X}(t') dt' - \sum_{i=1}^N \frac{\Gamma_i^2}{m_i \omega_i^2} X(0) \cos(\omega_i t), \quad (3.22)$$

sendo que

$$F(t) \equiv \sum_{i=1}^N \Gamma_i \left[x_i(0) \cos(\omega_i t) + p_i(0) \frac{\text{sen}(\omega_i t)}{m_i \omega_i} \right], \quad (3.23)$$

e corresponde à força flutuante. Esta força representa as interações microscópicas do meio com o sistema e tem papel inteiramente análogo ao da $F(t)$ descrito pela teoria de Langevin.

O termo associado a memória e a dissipação é definido por:

$$K(t-t') \equiv \sum_{i=1}^N \frac{\Gamma_i^2}{m_i \omega_i^2} \cos[\omega_i(t-t')], \quad (3.24)$$

que é o núcleo de memória. Vemos que a integral que aparece entre tempos distintos, calculada sobre o núcleo de memória na equação (3.22), apresenta um termo $\dot{X}(t')$ que corresponde ao momentum do sistema.

A equação (3.22) é a equação de Langevin generalizada, cuja força flutuante $F(t)$ é dada pela expressão (3.23) e o núcleo de memória $K(t-t')$ é definido pela equação (3.24). Se todos os termos de memória forem desprezados e garantirmos que $F(t)$ corresponda a uma distribuição gaussiana centrada em zero², então obteremos novamente a descrição do movimento browniano e $X(t)$ denotará a posição e $P(t)$ o momentum da partícula browniana.

²Os detalhes matemáticos das propriedades estatísticas se encontram na seção 3.3

Colocada na forma (3.22), fica evidente que o sistema está sujeito a um potencial efetivo que é definido por:

$$V_{\text{efetivo}}(X) \equiv V(X) - \sum_{i=1}^N \frac{\Gamma_i^2}{2m_i\omega_i^2} X(t)^2, \quad (3.25)$$

de modo que

$$\frac{\partial V_{\text{efetivo}}(X)}{\partial X} = \frac{\partial V(X)}{\partial X} - \sum_{i=1}^N \frac{\Gamma_i^2}{m_i\omega_i^2} X(t). \quad (3.26)$$

Um outro termo da equação (3.22) que precisamos devotar nossa atenção é aquele dependente da condição inicial do sistema: $-\sum_{i=1}^N \frac{\Gamma_i^2}{m_i\omega_i^2} X(0) \cos(\omega_i t)$. Em simulações numéricas, como as que descreveremos no capítulo 5, é usual tomarmos $X(0) = 0$, em razão da interação no tempo $t = 0$ ser nula entre sistema e banho. Contudo, no caso em que $X(0) \neq 0$, então há uma força adicional. É comum redefinir a força flutuante em termos deste novo termo [6, 10]. Isto, porém, força à redefinição da distribuição utilizada no tratamento estatístico, que será discutido na seção seguinte, de maneira que deve apresentar um termo de “shift” para compensar o termo de força adicional quando $X(0) \neq 0$ for escolhida.

3.3 O tratamento estatístico

Conforme vimos, a equação de Langevin para o movimento browniano, bem como a equação generalizada de Langevin, consiste em um sistema estocástico em razão das forças que fazem o papel do banho térmico serem geradas aleatoriamente. Como consequência, um tratamento integrável para todo o tempo $t > 0$ se torna inviável, o que implica a necessidade de um tratamento estatístico.

Neste ponto é importante relembrarmos aqui a formulação do teorema da equipartição da energia. Em resumo este teorema afirma que um sistema físico com muitos graus de liberdade e em equilíbrio térmico, a energia cinética é distribuída igualmente entre os graus de liberdade quadráticos. Consideremos novamente a situação descrita pela figura 3.2. Se, por hipótese, os N osciladores harmônicos que compõe o banho estiverem em equilíbrio térmico em $t = 0$, então devemos ter:

$$\frac{m_i\omega_i^2}{2} \langle x_i^2 \rangle + \frac{\langle p_i^2 \rangle}{2m_i} = \frac{1}{\beta}, \quad (3.27)$$

para cada um dos osciladores do banho, sendo $\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B correspondendo à constante

de Boltzmann e T a temperatura do banho. As médias são realizadas sobre o *ensemble*, ou seja, em várias realizações. Este resultado permanece válido no *ensemble* canônico ou microcanônico e também com as médias efetuadas no tempo sob a hipótese da ergodicidade.

Em outros termos, podemos atribuir uma função de distribuição microcanônica para a distribuição das condições iniciais considerando as energias de cada um dos osciladores individualmente:

$$\rho(x_0, p_0) = Z_{MC}^{-1} \delta(H(x_0, p_0) - E_i), \quad (3.28)$$

ou ainda, as realizações podem ser tomadas no ensemble canônico, atribuindo uma temperatura T ao banho térmico

$$\rho(x_0, p_0) = Z_C^{-1} e^{-\beta H(x_0, p_0)}. \quad (3.29)$$

As constantes de normalização destas expressões correspondem à função de partição destas distribuições:

$$Z_{MC} = \prod_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \delta\{H[x_i(0), p_i(0)] - E_i\} dx_0 dp_0, \quad (3.30)$$

para o ensemble microcanônico e

$$Z_C = \prod_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta H[x_i(0), p_i(0)]} dx_i(0) dp_i(0), \quad (3.31)$$

para o ensemble canônico, onde a integral é tomada sobre as condições iniciais considerando todos os N graus de liberdade do banho.

Considerando o banho térmico composto de osciladores harmônicos, então é possível efetuar o tratamento estatístico através de quantidades como a média e o desvio quadrático médio da posição e momentum.

Com efeito, uma das dificuldades em explicar um movimento como o browniano consiste na observação da velocidade do objeto macroscópico sujeito a interações microscópicas. Embora a energia cinética média possa ser determinada pelo teorema da equipartição da energia, continuamente a molécula muda sua direção e o problema passa a ser o da determinação da distância percorrida por tal molécula. De fato, das proposições de independência de Einstein para o movimento browniano, cada colisão da partícula browniana é independente das demais. Assim, para cada realização, haverá em outra realização o ca-

minho simétrico entre duas colisões, de maneira que a média do deslocamento da partícula browniana será nulo.

No modelo de Caldeira-Leggett apresentado na seção anterior, nada afirmamos sobre a independência das colisões. Na sua forma mais geral, que corresponde à derivação da equação generalizada de Langevin (3.22), temos uma forma funcional para a força flutuante $F(t)$, equação (3.23), que corresponde à resposta do banho ao sistema e não assumimos ser o processo markoviano. Neste ponto, esta passa a ser a questão das propriedades da força flutuante. No sentido de Langevin, devemos esperar média nula de $F(t)$ nas realizações do banho, mas não necessariamente uma função delta na autocorrelação.

A média no *ensemble* canônico da força flutuante é calculada por meio de:

$$\langle F(t) \rangle = \sum_{i=1}^N \Gamma_i \left[\langle x_i(0) \rangle \cos(\omega_i t) + \langle p_i(0) \rangle \frac{\text{sen}(\omega_i t)}{m_i \omega_i} \right], \quad (3.32)$$

A função partição canônica para o conjunto de N osciladores harmônicos do banho é dada por:

$$Z = \prod_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\beta \left(\frac{p_i(0)^2}{2m_i} + \frac{m_i \omega_i^2}{2} x_i(0)^2 \right) \right] dx_i(0) dp_i(0) \quad (3.33)$$

$$= \left(\frac{2\pi}{\beta} \right)^N \prod_{i=1}^N \frac{1}{\omega_i}. \quad (3.34)$$

Para o cálculo das médias, observamos que a função hamiltoniana somente dos osciladores harmônicos é uma forma quadrática nas coordenadas do banho, então é evidente que as integrais que dependam da distribuição (3.29) serão gaussianas:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp[-(ay^2 + by + c)] dy = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(\frac{b^2}{4a} - c\right), \quad (3.35)$$

um resultado já conhecido.

Logo,

$$\langle x_i(0) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x_i(0) \rho(x_i(0), p_i(0)) dx_0^{(i)} dp_0^{(i)} = 0, \quad (3.36)$$

$$\langle p_i(0) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p_i(0) \rho(x_i(0), p_i(0)) dx_0^{(i)} dp_0^{(i)} = 0. \quad (3.37)$$

Assim, para a força flutuante:

$$\langle F(t) \rangle = 0. \quad (3.38)$$

A forma de avaliarmos a conexão entre colisões sucessivas é justamente através da função de autocorrelação de $F(t)$ em tempos distintos:

$$\begin{aligned} \langle F(t)F(t') \rangle &= \sum_{i=1}^N \Gamma_i^2 \left\{ \langle x_i(0)^2 \rangle \cos(\omega_i t) \cos(\omega_i t') + \frac{\langle x_i(0)p_i(0) \rangle}{m_i \omega_i} \text{sen}[\omega_i(t-t')] \right. \\ &\quad \left. + \frac{\langle p_i(0)^2 \rangle}{m_i^2 \omega_i^2} \text{sen}(\omega_i t) \text{sen}(\omega_i t') \right\}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Como as integrais referentes às médias são gaussianas e a hamiltoniana não apresenta termos cruzados, temos:

$$\langle x_i(0)p_i(0) \rangle = 0, \quad (3.40)$$

$$\langle x_i(0)^2 \rangle = \frac{(m_i \omega_i^2)^{-1}}{\beta}, \quad (3.41)$$

$$\langle p_i(0)^2 \rangle = \frac{m_i}{\beta}. \quad (3.42)$$

Portanto, a função de autocorrelação (3.39) resulta em:

$$\langle F(t)F(t') \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_{i=1}^N \frac{\Gamma_i^2}{m_i \omega_i^2} \cos[\omega_i(t-t')]. \quad (3.43)$$

A comparação da equação (3.43) com a expressão do núcleo de memória (3.24) nos permite escrever:

$$\langle F(t)F(t') \rangle = \frac{K(t-t')}{\beta}. \quad (3.44)$$

Este belíssimo resultado, conhecido como relação de flutuação-dissipação, tem um significado profundo: trata-se da conexão entre a força flutuante e o núcleo de memória, associado também à dissipação devida ao meio no qual o sistema está imerso. Em outras palavras, é a relação (3.44) que permite afirmar que a dissipação em razão do meio tem a mesma origem microscópica das forças que impulsionam constantemente a partícula do sistema. Em particular, a propriedade (3.7), apresentada no início deste capítulo, corresponde ao teorema de flutuação-dissipação também. No entanto, como comentamos, alguns detalhes do meio são desconhecidos naquela abordagem.

3.4 A descrição do movimento browniano através de um mapa

Com o desenvolvimento da teoria de sistemas dinâmicos, C. Beck e colaboradores estudaram as propriedades de um mapa do tipo Kaplan-Yorke, dado por [42]:

$$L_{n+1} = 1 - 2L_n^2, \quad (3.45)$$

$$Y_{n+1} = \lambda Y_n + L_{n+1}. \quad (3.46)$$

Embora este sistema seja determinístico, pode ocorrer caos em razão do termo quadrático em L_n na equação (3.45). Assim, o comportamento exibido pelo mapa do tipo Kaplan-Yorke é muito semelhante ao comportamento da equação de Langevin. Para descrever a partícula browniana, Beck supôs que a coordenada L do mapa (3.45) agisse como a força flutuante e a trajetória unidimensional da partícula fica inteiramente determinada por:

$$r_{n+1} = r_n + L_n, \quad (3.47)$$

sendo r_n a posição da partícula no instante n . Note que na expressão (3.46), a variável Y_n representa o momentum da partícula e o mapa (3.45) fornece o análogo discreto da força flutuante na abordagem de Langevin. À partir do acoplamento de mapas do tipo Kaplan-Yorke, é possível descrever a dinâmica de partículas brownianas interagentes [43].

A razão pela qual o mapa de Beck descreve bem o movimento browniano, é justamente devido ao mapa caótico representar a força flutuante. Em um mapa caótico, a densidade de probabilidade pode ser gaussiana de modo que a descrição é bastante similar a de P. Langevin. Em particular, a figura 3.1 que ilustra o movimento browniano na abertura deste capítulo, pode ser gerada com o mapa de Beck, dado pelas expressões (3.45), (3.46) e (3.47), generalizado para duas dimensões.

O mapa generalizado

Neste capítulo temos como o objetivo apresentar o modelo proposto para investigação, bem como os resultados analíticos obtidos nesta tese que foram publicados [44].

4.1 O modelo proposto

Iniciamos o estudo com a hamiltoniana dependente do tempo:

$$H(t) = H_S(t) + H_I(t) + H_B(t), \quad (4.1)$$

sendo

$$H_S(t) = \frac{P^2}{2M} + V(X) \sum_{n=0}^{\infty} \delta\left(\frac{t}{\tau} - n\right), \quad (4.2)$$

$$H_I(t) = - \sum_{i=1}^N \Gamma_i x_i X \sum_{n=0}^{\infty} \delta\left(\frac{t}{\tau} - n\right), \quad (4.3)$$

$$H_B(t) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{m_i \omega_i^2 x_i^2}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \delta\left(\frac{t}{\tau} - n\right) \right], \quad (4.4)$$

onde $H_S(t)$, $H_B(t)$ e $H_I(t)$ correspondem às hamiltonianas do sistema, banho e interação, respectivamente. O impulso periódico, aqui representado por $\sum_{n=0}^{\infty} \delta\left(\frac{t}{\tau} - n\right)$, é entendido da seguinte maneira: o potencial é “ligado” nos tempos em que ocorre o “kick”. Entre os impulsos periódicos, de intervalo τ , a partícula do sistema ou os osciladores do banho se movem como partículas livres.

Nestas expressões, as letras maiúsculas correspondem a variáveis e parâmetros do

sistema ao passo que as letras minúsculas denotam as variáveis do banho. Ainda com base nas hamiltonianas dadas, (X, P) é o par conjugado posição-momentum da partícula do sistema central, enquanto (x_i, p_i) é o par conjugado posição-momentum do i -ésimo oscilador do banho, sendo $i = 1, 2, \dots, N$.

De maneira equivalente à apresentada anteriormente no modelo sem impulsos periódicos, o parâmetro Γ_i corresponde ao acoplamento, que é bilinear nas coordenadas do banho e do sistema. O parâmetro M representa a massa da partícula do sistema central, imerso em banho de osciladores harmônicos, cada um com massa m_i e frequência de oscilação igual a ω_i ($i = 1, 2, \dots, N$).

Com tal estrutura para a hamiltoniana dependente do tempo, podemos proceder da maneira apresentada no capítulo 2 com a finalidade de obtermos a discretização para o sistema:

$$P_{n+1} = P_n - \tau \left. \frac{\partial V(X)}{\partial X} \right|_{X=X_n} + \tau \sum_{i=1}^N \Gamma_i x_n^{(i)}, \quad (4.5)$$

$$X_{n+1} = X_n + \frac{\tau}{M} P_{n+1}. \quad (4.6)$$

Para o banho de osciladores temos:

$$p_{n+1}^{(i)} = p_n^{(i)} - m_i \omega_i^2 \tau x_n^{(i)} + \tau \Gamma_i X_n, \quad (4.7)$$

$$x_{n+1}^{(i)} = x_n^{(i)} + \frac{\tau}{m_i} p_{n+1}^{(i)}. \quad (4.8)$$

Com o objetivo de compreendermos o banho de osciladores com “kick”, podemos construir o espaço de fases de um único oscilador (*i. e.* com $\Gamma_i = 0$) para frequências distintas. Consideremos inicialmente massas iguais ($m_i = 1M$, com M sendo a unidade de massa) e $\tau = 1T$, com T sendo a unidade de tempo. A figura 4.1 mostra o espaço de fases para três trajetórias do mapa do banho (com $\Gamma_i = 0$), iniciando todas com a mesma condição inicial, porém com frequências ω distintas.

Conforme observamos na figura 4.1, as órbitas de um único oscilador com “kick” formam elipses no espaço de fases. Se compararmos com o espaço de fases de um oscilador harmônico a tempo contínuo, veremos que o efeito do “kick” é rotacionar o semi-eixo maior das elipses por um ângulo que é dependente da frequência. Neste sentido, é natural esperarmos que a forma quadrática $h(x_n, p_n) = ax_n^2 + bp_n^2 + cx_n p_n$ seja uma constante de

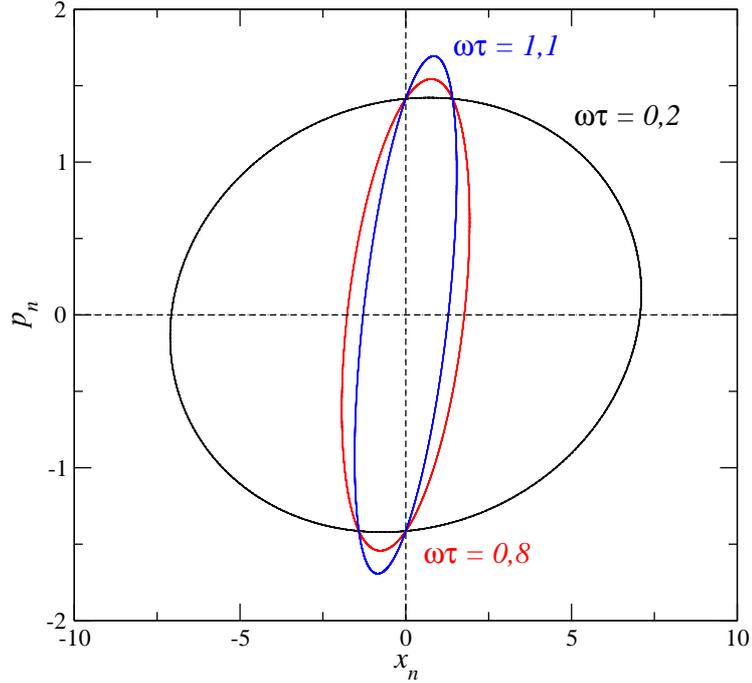


Figura 4.1: Espaço de fases para uma única condição inicial $(x_0, p_0) = (0, \sqrt{2})$ mostrando o efeito de variar a frequência ω , para $\omega\tau = 0,2$ (órbita em preto), $\omega\tau = 0,8$ (vermelho) e $\omega\tau = 1,1$ (azul).

movimento. Matematicamente, podemos expressar esta condição por:

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{h(x_{n+1}, p_{n+1}) - h(x_n, p_n)}{\tau} = 0, \quad (4.9)$$

onde omitimos o índice i por se tratar de um único oscilador.

Desta maneira, obtemos para um oscilador com “kick”:

$$h(x, p) = \frac{m\omega^2}{2}x^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{\omega^2\tau}{2}xp, \quad (4.10)$$

a menos de uma constante multiplicativa. Na expressão (4.10), $h(x, p)$ é a constante de movimento de um oscilador com “kick”, sendo m a sua massa e ω a frequência de oscilação. Omitimos o índice n do tempo discreto devido à constância da (4.10) para qualquer tempo.

Com a finalidade de evitarmos problemas de escalas de tempo nas simulações numéricas e também de estudarmos a dinâmica do mapa proposto, podemos reescrever os mapas do sistema (4.5), (4.6) e do banho (4.7), (4.8) com o emprego de variáveis adimensionais. Isto é feito pela atribuição de variáveis características ao problema e que contenham as dimensões a serem eliminadas. Vamos iniciar o processo de adimensionalização através do mapa do banho.

A análise dimensional da constante de movimento $h(x, p)$ evidencia o fato de que esta quantidade tem dimensão¹ de energia, *i. e.*, ML^2T^{-2} . Assim, podemos dividir ambos os lados da equação (4.10) por uma quantidade E com dimensão de energia. Em outras palavras:

$$\frac{h(x, p)}{E} = \frac{m\omega^2}{2E}x^2 + \frac{p^2}{2mE} - \frac{\omega^2\tau}{2E}xp, \quad (4.11)$$

a exemplo do que é feito no caso do oscilador harmônico a tempo contínuo, isto é, sem impulsos periódicos.

É evidente que agora a quantidade expressa pela equação (4.11) é adimensional, pois E também tem dimensão de energia. Isto sugere uma escolha natural para o par conjugado adimensional (\bar{x}_n, \bar{p}_n) . Matematicamente:

$$\bar{x}_n^{(i)} \rightarrow \frac{x_n^{(i)}}{\sqrt{E/m_i\omega_i^2}}, \quad (4.12)$$

$$\bar{p}_n^{(i)} \rightarrow \frac{p_n^{(i)}}{\sqrt{m_i E}}, \quad (4.13)$$

de modo que possamos definir as posições e momenta característicos para o banho.

Com a escolha acima, a constante (4.11) se torna:

$$\bar{h}(\bar{x}, \bar{p}) = \frac{\bar{x}^2}{2} + \frac{\bar{p}^2}{2} - \frac{k}{2}\bar{x}\bar{p}, \quad (4.14)$$

onde definimos o parâmetro adimensional $k_i \equiv \omega_i\tau$, para cada oscilador. A expressão (4.14) evidencia o fato já mostrado numericamente: que as órbitas obedecem à equação de uma elipse rotacionada no espaço de fases (\bar{x}, \bar{p}) . É trivial mostrar que os semi-eixos maiores das órbitas elípticas nas coordenadas adimensionais (\bar{x}, \bar{p}) estão todos orientados com ângulo $\phi = \pi/4$ rad. Nesta escala, a inclinação de cada uma das órbitas independe da frequência ω_i , sendo que agora o efeito do aumento do parâmetro associado de frequência k_i corresponderá a um achatamento das órbitas em relação aos semi-eixos menores e a um alongamento correspondente nos semi-eixos maiores.

Pela atribuição de variáveis características, podemos escrever para a posição do sistema:

$$\bar{X}_{n+1} = \bar{X}_n + \left(\frac{\tau}{M} \cdot \frac{P_c}{X_c} \right) \bar{P}_{n+1}. \quad (4.15)$$

O termo entre parênteses na expressão (4.15) pode ser naturalmente tomado como a unidade, uma vez que contêm as variáveis características. Daqui por diante, as variáveis

¹Utilizamos aqui, naturalmente, os padrões do Sistema Internacional de Unidades.

adimensionais serão mostradas sem a barra superior, para simplificação na notação.

Com o intuito da adimensionalização do sistema, podemos expressar as razões das grandezas características:

$$\frac{p_c}{x_c} = m_i \omega_i, \quad (4.16)$$

$$\frac{X_c}{P_c} = \frac{\tau}{M}, \quad (4.17)$$

onde o índice c nas variáveis denota o fato de serem grandezas características.

Com os procedimentos acima descritos para o sistema e para o banho, teremos para os termos de acoplamento:

$$\frac{\tau \Gamma_i x_c}{P_c} = \gamma_i, \quad (4.18)$$

$$\frac{\tau \Gamma_i X_c}{p_c} = \frac{\gamma_i}{k_i}, \quad (4.19)$$

sendo γ_i o parâmetro de acoplamento adimensional.

Deste modo, as escolhas (4.12), (4.13), (4.18) e (4.19) conduzem ao mapa:

$$P_{n+1} = P_n - \frac{\partial v(X)}{\partial X} \Big|_{X=X_n} + \sum_{i=1}^N \gamma_i x_n^{(i)}, \quad (4.20)$$

$$X_{n+1} = X_n + P_{n+1}, \quad (4.21)$$

$$p_{n+1}^{(i)} = p_n^{(i)} - k_i x_n^{(i)} + \frac{\gamma_i}{k_i} X_n, \quad (4.22)$$

$$x_{n+1}^{(i)} = x_n^{(i)} + k_i p_{n+1}^{(i)}. \quad (4.23)$$

Este mapeamento permite o estudo no sentido da teoria de sistemas dinâmicos, bem como da análise de quantidades estatísticas associadas, como serão mostradas nas seções seguintes. Iniciaremos com uma análise do mapa somente para o banho de osciladores na seção que segue.

4.2 O mapa harmônico

Nesta seção vamos considerar o mapa somente para o banho de osciladores, isto é, o mapa (4.22) e (4.23) com $\gamma_i = 0$. O propósito disto é encontrarmos as soluções para o mapa do banho e estudarmos o ambiente pulsado, de maneira análoga ao que se faz na derivação da equação generalizada de Langevin no capítulo 3

O mapa para um oscilador harmônico pulsado é, então, escrito como segue:

$$p_{n+1} = p_n - kx_n \quad (4.24)$$

$$x_{n+1} = x_n + kp_{n+1}, \quad (4.25)$$

sendo k proporcional à frequência do oscilador, conforme a adimensionalização feita na seção anterior.

A exemplo do que fizemos na seção anterior, podemos construir o espaço de fases do mapa composto pelas expressões (4.24) e (4.25). Seleccionamos uma condição inicial, dada por $(x_0, p_0) = (0, \sqrt{2})$, e iteramos o mapa. A figura 4.2 apresenta o espaço de fases para o mapa de um único oscilador com “kick” com três valores distintos do parâmetro de frequência adimensional k .

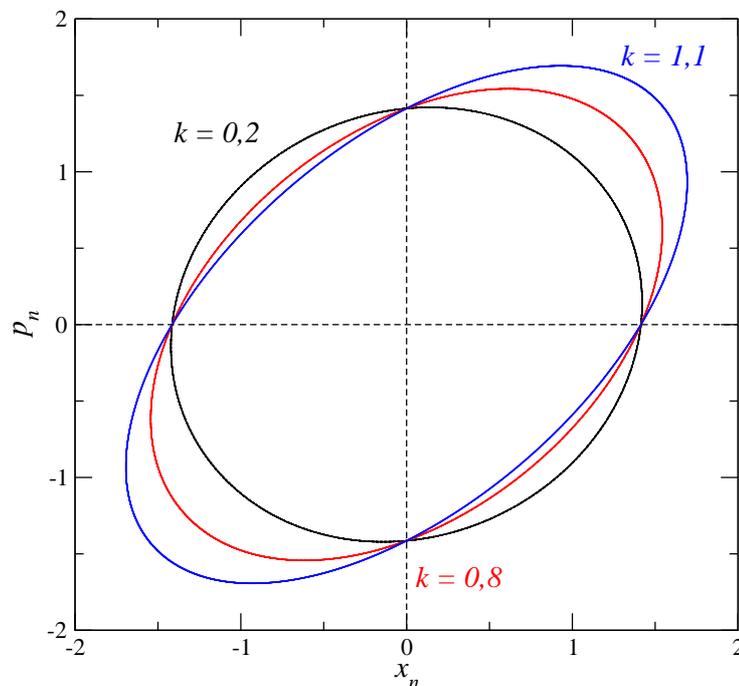


Figura 4.2: Espaço de fases para uma única condição inicial $(x_0, p_0) = (0, \sqrt{2})$ contendo três órbitas para valores distintos do parâmetro k : $k = 0,2$ (órbita em preto), $k = 0,8$ (vermelho) e $k = 1,1$ (azul).

Na figura 4.2 é possível perceber que a alteração provocada nas órbitas, em decorrência da escolhas das frequências, é o alongamento na direção do semi-eixo maior da elipse e o achatamento na direção do semi-eixo menor da elipse.

O mapa dado pelas equações (4.24) e (4.25) é linear em (x, p) . Como consequência, a matriz dos coeficientes coincide com a matriz jacobiana do sistema dinâmico, de tal forma

que podemos fazer:

$$\begin{pmatrix} x_n \\ p_n \end{pmatrix} = \prod_{n'=0}^{n-1} DM(x_{n'}, p_{n'}) \begin{pmatrix} x_0 \\ p_0 \end{pmatrix}, \quad (4.26)$$

onde consideramos (x_0, p_0) a condição inicial do mapa e DM a matriz jacobiana, conforme apresentada no capítulo 2, sendo aqui igual a

$$DM(x_n, p_n) = \begin{pmatrix} 1 - k^2 & k \\ -k & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.27)$$

independente do ponto calculado, por se tratar de um sistema linear, de modo que passaremos a chamar a matriz apenas de DM . Como consequência, resulta para o produtório da equação (4.26):

$$\prod_{n'=0}^{n-1} DM(x_{n'}, p_{n'}) = DM^n, \quad (4.28)$$

que é uma matriz quadrada de ordem 2. Sejam $\vec{v}_{1,2}$ os autovetores da matriz DM^n . A diagonalização é feita com a definição da matriz dos autovetores, a qual chamaremos aqui de P e definida por:

$$P = \begin{bmatrix} \vec{v}_1 & \vec{v}_2 \end{bmatrix}, \quad (4.29)$$

de maneira que a matriz diagonalizada possa ser escrita

$$\mathcal{D} = P^{-1}(DM)P, \quad (4.30)$$

cujos elementos da diagonal principal são os autovalores da matriz original.

A diagonalização de DM^n resulta na matriz:

$$\mathcal{D}^n = \begin{bmatrix} \left(\frac{2-k^2+k\sqrt{k^2-4}}{2}\right)^n & 0 \\ 0 & \left(\frac{2-k^2-k\sqrt{k^2-4}}{2}\right)^n \end{bmatrix}. \quad (4.31)$$

Podemos aqui tomar apenas o termo entre parênteses dos elementos matriciais, os quais chamaremos de Λ_1 e Λ_2 :

$$\Lambda_{1,2} = 1 - \frac{k^2}{2} \pm k\sqrt{\frac{k^2-4}{4}}. \quad (4.32)$$

Verificamos que no espaço de fases as órbitas correspondem a órbitas fechadas para cada um dos osciladores, desde que a frequência obedeça à condição $0 \leq k < 2$, o que correspondem à funções limitadas no espaço de fases. Logo, podemos reescrever os auto-

valores (4.32) da seguinte maneira:

$$\Lambda_{1,2} = 1 - \frac{k^2}{2} \pm ik\sqrt{1 - \frac{k^2}{4}}, \quad (4.33)$$

com i sendo a unidade imaginária.

Como $\Lambda_{1,2}$ correspondem a números complexos de módulo unitário, podemos identificá-los com a forma polar, o que resulta para os autovalores (4.33):

$$\Lambda_{1,2} = \cos(\theta) \pm i \operatorname{sen}(\theta), \quad (4.34)$$

desde que

$$\theta \equiv \arctan\left(\frac{k\sqrt{1 - k^2/4}}{1 - k^2/2}\right). \quad (4.35)$$

Empregando o mesmo raciocínio utilizado acima, podemos então escrever os autovalores da matriz diagonalizada (4.31), os quais chamaremos de $\sigma_{1,2}$:

$$\sigma_{1,2} = [\cos(\theta) \pm i \operatorname{sen}(\theta)]^n, \quad (4.36)$$

e que, pela fórmula de de Moivre, resulta em:

$$\sigma_{1,2} = \cos(n\theta) \pm i \operatorname{sen}(n\theta). \quad (4.37)$$

Podemos rearranjar o sistema (4.26) de modo a obtermos, pelas propriedades da multiplicação de matrizes e da matriz identidade,

$$P^{-1} \begin{pmatrix} x_n \\ p_n \end{pmatrix} = \mathcal{D}^n P^{-1} \begin{pmatrix} x_0 \\ p_0 \end{pmatrix}. \quad (4.38)$$

Como consequência, temos as soluções para o mapa harmônico, ao resolvermos o

sistema linear (4.38):

$$x_n^{(i)} = \left[\cos(n\theta_i) - \frac{k_i}{2\sqrt{1-k_i^2/4}} \operatorname{sen}(n\theta_i) \right] x_0^{(i)} + \left[\frac{1}{\sqrt{1-k_i^2/4}} \operatorname{sen}(n\theta_i) \right] p_0^{(i)}, \quad (4.39)$$

$$p_n^{(i)} = - \left[\frac{k_i}{\sqrt{1-k_i^2/4}} \operatorname{sen}(n\theta_i) \right] x_0^{(i)} + \left[\cos(n\theta_i) + \frac{k_i}{\sqrt{1-k_i^2/4}} \operatorname{sen}(n\theta_i) \right] p_0^{(i)}. \quad (4.40)$$

Nas expressões (4.39) e (4.40) colocamos o índice i com a finalidade de evidenciar que as soluções são válidas para cada um dos N osciladores do banho de maneira independente. É importante notar que qualquer condição inicial diverge para $k \geq 2$. Do ponto de vista da teoria de sistemas dinâmicos, tais pontos se tornam instáveis.

De posse dos resultados para um único oscilador com impulsos periódicos, podemos calcular a distribuição tanto para a posição quanto para o momentum de cada oscilador, definida por:

$$\Phi(x) = A \int_{-\infty}^{\infty} \delta(h(x, p) - E) dp, \quad (4.41)$$

com E sendo o valor da constante de movimento no instante inicial e A a constante de normalização. Omitimos aqui o índice da iterada n , pois estamos interessados na forma funcional para $\Phi(x)$ e pelo fato também de que $h(x_n, p_n) = h(x_{n+1}, p_{n+1})$.

Para calcularmos estas distribuições, utilizamos da seguinte propriedade da função delta de uma função $r : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, com x pertencente ao domínio da função:

$$\delta[r(x)] = \sum_j \frac{\delta(x - x_j)}{|r'(x_j)|}, \quad (4.42)$$

onde a soma se estende a todas as raízes da função $r(x)$ e $r'(x_j)$ denota a derivada de $r(x)$ no ponto $x = x_j$.

A realização do cálculo da distribuição (4.41) tanto para a posição quanto para o

momentum, respectivamente, fornece:

$$\Phi(x) = \frac{1/\pi}{\sqrt{\frac{2E}{1-k^2/4} - x^2}}, \quad (4.43)$$

$$\Phi(p) = \frac{1/\pi}{\sqrt{\frac{2E}{1-k^2/4} - p^2}}. \quad (4.44)$$

Na figura 4.3 apresentamos tanto o histograma, obtido numericamente, quanto a distribuição analítica dada pelas equações (4.43) e (4.44) para a posição e momentum do mapa harmônico. Geramos numericamente uma trajetória e, à partir das séries temporais da posição e do momentum, o histograma é obtido.

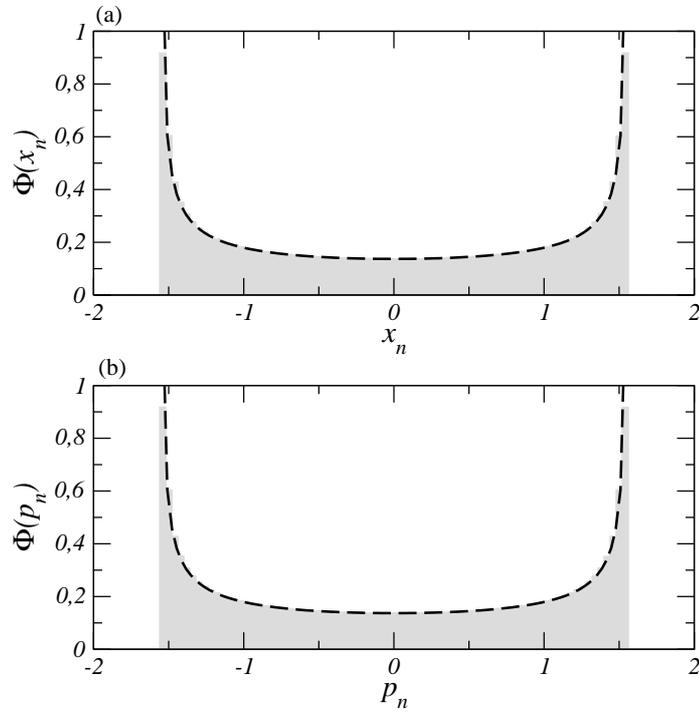


Figura 4.3: As distribuições para a (a) posição e para o (b) momentum de um oscilador com impulsos periódicos com $k = 0,8$. Em cinza está mostrado o histograma da série temporal, tanto de x_n quanto de p_n e as curvas pretas são dadas pelas equações (4.43) e (4.44).

Das distribuições (4.43) e (4.44), temos que a amplitude é dada por:

$$B = \sqrt{\frac{2E}{1 - k^2/4}}, \quad (4.45)$$

ou seja, difere da amplitude do oscilador harmônico a tempo contínuo [45] em razão dos impulsos periódicos. De fato, este é um dos efeitos da introdução dos “kicks”.

Estudamos até agora um único mapa harmônico de modo a compreender a dinâmica de cada um dos mapas que compõem o banho térmico. Algo interessante de se notar, porém, é que o mapa padrão dado pelas relações (2.25) e (2.24) se reduz ao mapa harmônico, no limite de deslocamentos pequenos.

4.3 O sistema imerso em banho harmônico discreto

Com o objetivo de obtermos agora a solução explícita inclusive para o caso $\gamma_i \neq 0$, mostramos alguns coeficientes de x_0 , p_0 e $\{X_{n'}\}_{n'=0}^2$, na tabela 4.1, para as três primeiras iteradas do mapa da coordenada do banho, dado pela equação (4.23), com $\gamma_i \neq 0$.

Para construir a tabela 4.1, fazemos:

$$\begin{aligned} x_1^{(i)} &= (1 - k_i^2)x_0^{(i)} + k_i p_0^{(i)} + \frac{\gamma_i}{k_i} X_0, \\ x_2^{(i)} &= (1 - 3k_i^2 + k_i^4)x_0^{(i)} + k_i(2 - k_i)p_0^{(i)} + \frac{\gamma_i}{k_i}(2 - k^2)X_0 + \frac{\gamma_i}{k_i} X_1, \end{aligned}$$

e tomamos os coeficientes das condições iniciais do banho e do sistema, com as iteradas do sistema implícitas.

Tabela 4.1: Os coeficientes das primeiras iteradas do mapa harmônico acoplado ao sistema central.

n	x_0	$k p_0$	$\frac{\gamma_i}{k_i} X_0$	$\frac{\gamma_i}{k_i} X_1$	$\frac{\gamma_i}{k_i} X_2$
1	$1 - k^2$	1	1	$\overline{\neq}$	$\overline{\neq}$
2	$1 - 3k^2 + k^4$	$2 - k^2$	$2 - k^2$	1	$\overline{\neq}$
3	$1 - 6k^2 + 5k^4 - k^6$	$3 - 4k^2 + k^4$	$3 - 4k^2 + k^4$	$2 - k^2$	1

A partir da tabela 4.1 é possível percebermos que a geração dos coeficientes pode ser dada por meio do mapa:

$$g_{n+1}^{(i)} = g_n^{(i)} - k_i^2 f_{n+1}^{(i)} \quad (4.46)$$

$$f_{n+1}^{(i)} = f_n^{(i)} + g_n^{(i)}, \quad (4.47)$$

cujas condições iniciais devem necessariamente satisfazer: $g_0^{(i)} = 1 - k_i^2$, $f_0^{(i)} = 1$, independentemente do oscilador.

Os resultados acima combinados, tanto das soluções (4.39) e (4.40) quanto da tabela (4.1), permitem escrevermos a solução explícita nas coordenadas do banho de osciladores

harmônicos com $\gamma_i \neq 0$:

$$x_n^{(i)} = g_{n-1}^{(i)} x_0^{(i)} + k_i f_{n-1}^{(i)} p_0^{(i)} + \gamma_i \sum_{n'=0}^{n-1} X_{n'} f_{n-n'-1}^{(i)}, \quad (4.48)$$

$$p_n^{(i)} = -k_i f_{n-1}^{(i)} x_0^{(i)} + (g_{n-1}^{(i)} + k_i^2 f_{n-1}^{(i)}) p_0^{(i)} + \frac{\gamma_i}{k_i} \sum_{n'=0}^{n-1} X_{n'} (g_{n-n'-1}^{(i)} + k_i^2 f_{n-n'-1}^{(i)}). \quad (4.49)$$

Identificando as soluções dadas pelas equações (4.39) e (4.40) com as soluções (4.48) e (4.49) para $\gamma_i = 0$, resulta em:

$$g_n^{(i)} = \cos [(n+1)\theta_i] - \frac{k_i}{2\sqrt{1-k_i^2/4}} \operatorname{sen} [(n+1)\theta_i] \quad (4.50)$$

$$f_n^{(i)} = \frac{1}{k_i \sqrt{1-k_i^2/4}} \operatorname{sen} [(n+1)\theta_i], \quad (4.51)$$

para os coeficientes da solução em qualquer tempo n .

4.4 A relação de flutuação-dissipação

Podemos agora trabalhar de maneira semelhante ao desenvolvimento da equação generalizada de Langevin, a qual foi desenvolvida no capítulo 3.

Vamos considerar novamente o mapa para o momentum do sistema, dado pela expressão (4.20). Podemos notar que há uma dependência no acoplamento exatamente na posição de cada oscilador do banho. A substituição da solução (4.48) no mapa (4.20) resulta em:

$$P_{n+1} = P_n - \left. \frac{\partial v(X)}{\partial X} \right|_{X=X_n} + \sum_{i=1}^N \gamma_i \left[g_{n-1}^{(i)} x_0^{(i)} + k_i f_{n-1}^{(i)} p_0^{(i)} + \gamma_i \sum_{n'=0}^{n-1} X_{n'} f_{n-n'-1}^{(i)} \right]. \quad (4.52)$$

Note que a equação (4.52) é o análogo a tempo discreto da equação (3.21). A última parcela do lado direito da expressão (4.52) contém um termo com uma soma dos tempos, que é análogo à integral de memória na (3.21). Isto sugere que termos de memória e, eventualmente, dissipação, devem surgir de tal parcela. É possível rearranjar esta parcela, de maneira semelhante ao que se faz na integração por partes para o tempo contínuo, procedendo da maneira como segue, com o emprego do mapa dos coeficientes

(4.46) e (4.47) em tempos distintos:

$$\sum_{i=0}^{n-1} X_{n'} f_{n-n'-1}^{(i)} = \sum_{i=0}^{n-1} X_{n'} \left[\frac{g_{n-n'-2}^{(i)} - g_{n-n'-1}^{(i)}}{k_i^2} \right] \quad (4.53)$$

Após as modificações necessárias (cf. Apêndice B), chegamos à:

$$\sum_{i=0}^{n-1} X_{n'} f_{n-n'-1}^{(i)} = \frac{1}{k_i^2} \left[g_{-1}^{(i)} X_n - g_{n-1}^{(i)} X_0 - \sum_{n'=1}^n g_{n-n'-1}^{(i)} P_{n'} \right], \quad (4.54)$$

onde fizemos uso do mapa (4.21).

A equação (4.54) substituída no mapa (4.52) resulta em:

$$P_{n+1} = P_n - \left. \frac{\partial v_{\text{efetivo}}(X)}{\partial X} \right|_{X=X_n} + F_n - \sum_{n'=1}^n K_{n,n'} P_{n'} - \sum_{i=1}^N \frac{\gamma_i^2}{k_i^2} g_{n-1}^{(i)} X_0 \quad (4.55)$$

$$X_{n+1} = X_n + P_{n+1}, \quad (4.56)$$

onde o potencial efetivo é definido como

$$v_{\text{efetivo}}(X_n) \equiv v(X_n) - \sum_{i=1}^N \frac{\gamma_i^2 X_n^2}{2} \quad (4.57)$$

e F_n é a força definida por:

$$F_n \equiv \sum_{i=1}^N \gamma_i \left[g_{n-1}^{(i)} x_0^{(i)} + k_i f_{n-1}^{(i)} p_0^{(i)} \right]. \quad (4.58)$$

Esta força tem papel semelhante à força flutuante da equação de Langevin. De fato, o mapa dado pelas equações (4.55) e (4.56) fornece a dinâmica para o sistema de uma partícula sujeita a um potencial $v_{\text{efetivo}}(X_n)$, cujo ambiente constitui um banho pulsado.

O termo $K_{n,n'}$ corresponde ao núcleo de memória e é definido aqui por:

$$K_{n,n'} \equiv \sum_{i=1}^N \left(\frac{\gamma_i^2}{k_i^2} \right) g_{n-n'-1}^{(i)}. \quad (4.59)$$

É de grande importância ressaltarmos o fato de que na derivação do mapa (4.55) não assumimos ser infinito o número de osciladores do banho. Também cabe lembrar a analogia imediata da relação (4.55) com o caso contínuo, dado pela equação (3.22). Também aqui aparece um termo de força similar ao que aparece na equação generalizada

de Langevin, dado pela soma: $-\sum_{i=1}^N \frac{\gamma_i^2}{k_i^2} g_{n-1} X_0$.

Conforme comentamos acima, a força F_n representa as interações microscópicas entre as partículas do banho e do sistema para cada iterada do mapa. Por conseguinte, para que possamos interpretar o mapa proposto neste capítulo no sentido de Langevin, esperamos que esta força flutuante discreta apresente as propriedades da força flutuante da equação contínua de Langevin. Em primeiro lugar, é razoável esperar que a interação média dos osciladores pulsados seja nula. Também é de interesse investigarmos o que ocorre com a função de autocorrelação entre tempos distintos da força flutuante discreta.

Se o banho estiver inicialmente em equilíbrio térmico, podemos atribuir uma temperatura para o banho considerando uma distribuição canônica, isto é:

$$\rho(x_0, p_0) = Z_C^{-1} e^{-\beta \sum_{i=1}^N h(x_0^{(i)}, p_0^{(i)})}, \quad (4.60)$$

onde $\beta \propto T^{-1}$, sendo T a temperatura absoluta e Z_C a função partição, obtida através de:

$$Z_C = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \sum_{i=1}^N h(x_0^{(i)}, p_0^{(i)})} dx_0^{(i)} dp_0^{(i)}, \quad (4.61)$$

onde empregamos o símbolo de integração apenas uma vez, embora a integração seja feita para todo par $(x_0^{(i)}, p_0^{(i)})$, com $i = 1, 2, \dots, N$.

Com o auxílio do resultado (3.35), obtemos então para a função partição:

$$Z_C = \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^N \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{1 - k_i^2/4}}. \quad (4.62)$$

De posse da função de partição (4.62), podemos calcular as médias $\langle F_n \rangle$ e $\langle F_n F_{n'} \rangle$. Para isto podemos notar pela equação (4.58) que $\langle F_n \rangle$ conterà apenas termos como $\langle x_0 \rangle$ e $\langle p_0 \rangle$, sem termos cruzados como $\langle x_0 p_0 \rangle$. Neste caso teremos:

$$\langle x_0^{(i)} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x_0^{(i)} \rho(x_0^{(i)}, p_0^{(i)}) dx_0^{(i)} dp_0^{(i)} = 0 \quad (4.63)$$

$$\langle p_0^{(i)} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p_0^{(i)} \rho(x_0^{(i)}, p_0^{(i)}) dx_0^{(i)} dp_0^{(i)} = 0. \quad (4.64)$$

Como consequência obtemos:

$$\langle F_n \rangle = \sum_{i=1}^N \gamma_i \left[g_{n-1}^{(i)} \langle x_0^{(i)} \rangle + k_i f_{n-1}^{(i)} \langle p_0^{(i)} \rangle \right] = 0. \quad (4.65)$$

Podemos fazer uso de um raciocínio análogo para o cálculo da correlação. Como $x_0^{(i)}$ e $p_0^{(i)}$ são as condições iniciais para cada um dos osciladores e a média aqui é tomada sobre as condições iniciais e independe do tempo, então podemos esperar que o produto $F_n F_{n'}$ conterá termos quadráticos e termos cruzados como $\langle x_0^2 \rangle$, $\langle p_0^2 \rangle$ e $\langle x_0 p_0 \rangle$. Assim, temos:

$$\langle x_0^{(i)2} \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{1}{(1 - k_i^2/4)} \quad (4.66)$$

$$\langle p_0^{(i)2} \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{1}{(1 - k_i^2/4)} \quad (4.67)$$

$$\langle x_0^{(i)} p_0^{(i)} \rangle = \frac{k_i/2}{\beta} \frac{1}{(1 - k_i^2/4)}. \quad (4.68)$$

Considerando a forma explícita para a correlação, temos:

$$\begin{aligned} \langle F_n F_{n'} \rangle &= \sum_{i=1}^N \gamma_i^2 \left[g_{n-1}^{(i)} g_{n'-1}^{(i)} \langle x_0^{(i)2} \rangle \right. \\ &\quad \left. + k_i \left(g_{n-1}^{(i)} f_{n'-1}^{(i)} + f_{n-1}^{(i)} g_{n'-1}^{(i)} \right) \langle x_0^{(i)} p_0^{(i)} \rangle + k_i^2 f_{n-1}^{(i)} f_{n'-1}^{(i)} \langle p_0^{(i)2} \rangle \right]. \end{aligned} \quad (4.69)$$

A substituição dos valores (4.66), (4.67) e (4.68) na expressão da correlação (4.69) fornece para a autocorrelação:

$$\langle F_n F_{n'} \rangle = \sum_{i=1}^N \frac{\gamma_i^2}{\beta k_i^2 (1 - k_i^2/4)} \cos[(n - n')\theta_i], \quad (4.70)$$

que difere da expressão (3.43) pelo fator $(1 - k_i^2/4)$ no denominador. Embora seja um longo trabalho, é possível demonstrar que em tempos apropriados o limite $\tau \rightarrow 0$ conduz ao resultado contínuo da equação generalizada de Langevin.

Para relacionarmos os dois resultados, vamos considerar o núcleo de memória discreta (4.59) e também o fato de que:

$$g_{n-n'-1}^{(i)} = \cos[(n - n')\theta_i] - \frac{k_i}{2\sqrt{1 - k_i^2/4}} \text{sen}[(n - n')\theta_i]. \quad (4.71)$$

Vamos explicitar $g_{n-n'-1}^{(i)}$ na expressão (4.59):

$$K_{n,n'} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\gamma_i}{k_i} \right)^2 \left\{ \cos[(n - n')\theta_i] - \frac{k_i}{2\sqrt{1 - k_i^2/4}} \text{sen}[(n - n')\theta_i] \right\},$$

e resolvermos para a diferença $\langle F_n F_{n'} \rangle - K_{n,n'}/\beta$, que chamaremos $\Psi_{n,n'}/\beta$. Já sabemos que no caso da equação de Langevin generalizada a tempo contínuo (3.22), esta diferença

deve ser nula:

$$\begin{aligned} \langle F_n F_{n'} \rangle - \frac{K_{n,n'}}{\beta} &= \sum_{i=1}^N \frac{\gamma_i^2}{\beta k_i^2} \left\{ \frac{\cos [(n - n')\theta_i]}{(1 - k_i^2/4)} \right. \\ &\quad \left. - \left[\cos [(n - n')\theta_i] - \frac{k_i}{2\sqrt{1 - k_i^2/4}} \operatorname{sen} [(n - n')\theta_i] \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.72)$$

Efetuadao o cálculo da diferença, podemos escrever:

$$\frac{\Psi_{n,n'}}{\beta} = \sum_{i=1}^N \frac{\gamma_i^2}{\beta k_i^2} \left[\frac{k_i^2}{4(1 - k_i^2/4)} \cos [(n - n')\theta_i] + \frac{k_i}{2\sqrt{1 - k_i^2/4}} \operatorname{sen} [(n - n')\theta_i] \right] \quad (4.73)$$

que não é nulo. De fato, a diferença se anulará ou no limite $\tau \rightarrow 0$, ou quando $\gamma_i = 0$, o que não faz sentido considerar. O limite $k_i \rightarrow 0$ equivale ao limite $\omega\tau \rightarrow 0$ e, portanto, $\tau \rightarrow 0$.

Ainda podemos escrever:

$$\frac{\Psi_{n,n'}}{\beta} = \sum_{i=1}^N \frac{\gamma_i^2}{\beta(1 - k_i^2/4)} \left\{ \frac{1}{4} \cos [(n - n')\theta_i] + \frac{\sqrt{1 - k_i^2/4}}{2k_i} \operatorname{sen} [(n - n')\theta_i] \right\}.$$

Consequentemente,

$$\langle F_n F_{n'} \rangle = \frac{K_{n,n'} + \Psi_{n,n'}}{\beta}, \quad (4.74)$$

sendo

$$\Psi_{n,n'} = \sum_{i=1}^N \frac{\gamma_i^2}{(1 - k_i^2/4)} \left\{ \frac{1}{4} \cos [(n - n')\theta_i] + \frac{\sqrt{1 - k_i^2/4}}{2k_i} \operatorname{sen} [(n - n')\theta_i] \right\}. \quad (4.75)$$

A equação (4.74) é de fundamental importância neste trabalho e representa uma forma não-usual de relação de flutuação-dissipação.

Na figura 4.4 apresentamos o cálculo numérico das funções $K_{n,0}$ e $\Psi_{n,0}$ para fins comparativos. Os detalhes das simulações computacionais serão discutidas no capítulo 5. Apenas para a ilustração neste capítulo, selecionamos as frequências do banho aleatoriamente seguindo uma distribuição proporcional ao quadrado das frequências.

É interessante notar que mesmo a função $\Psi_{n,0}$ tende a perder a correlação para $N \gg 1$ ao longo do tempo. Contudo, nos casos ilustrados na figura 4.4, as oscilações ainda são consideráveis, o que denota a forte dependência da dinâmica do sistema em relação ao banho estruturado. Fisicamente, podemos afirmar que este comportamento é devido ao

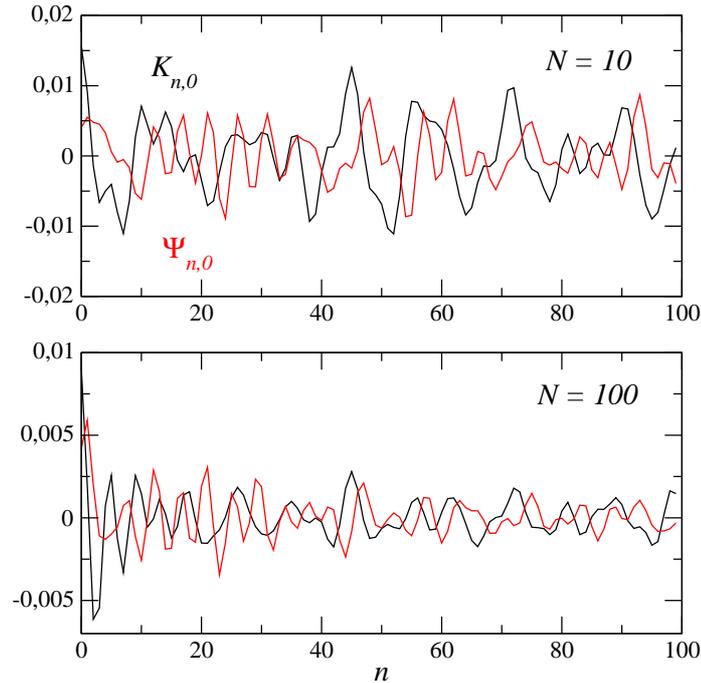


Figura 4.4: As funções $K_{n,0}$ em preto e $\Psi_{n,0}$ em vermelho para $N = 10$ (topo) e $N = 100$ (base).

“kick” introduzido no banho: a escala de tempo para os “kicks”, do banho e do sistema, é igual, de modo que possivelmente o “kick” não permita com que o sistema volte ao equilíbrio e a relação usual de flutuação-dissipação seja observada. Deste modo, por hipótese, escalas distintas de “kick” entre o ambiente e o banho podem permitir que o sistema e banho atinjam o equilíbrio, algo não considerado até agora.

Embora a relação não-usual da flutuação-dissipação obtida aqui não tenha sido relatada na literatura conhecida, a quebra do teorema da flutuação-dissipação já foi relatada para sistemas que apresentam superdifusão, o que conduz à definição de uma temperatura efetiva [46].

Embora as relações de recorrência para $g_n^{(i)}$ e $f_n^{(i)}$ não apresentem um limite definido para $k_i \rightarrow 0$, podemos tomar $\tau \rightarrow 0$ e mantermos ω_i fixo a fim de que $k_i \rightarrow 0$. Neste caso, a equação (4.74) toma a forma usual dependente apenas de $K_{n,n'}$: $\langle F_n F_{n'} \rangle = K_{n,n'} / \beta$ (*vide* Apêndice A).

No mapa (4.55), observamos que o termo $\sum_{n'=1}^n K_{n,n'} P_{n'}$ contém as informações da dissipação para o tempo n . Embora o problema como um todo (sistema, banho e interação) seja conservativo, se olharmos somente para o sistema, este apresentará dissipação, devido às trocas de energia entre o sistema central e o banho. É possível quantificar esta dissipação.

Com efeito, se tomarmos o tempo atual n , podemos fazer:

$$\sum_{n'=1}^n K_{n,n'} P_{n'} = K_{n,n} P_n + \sum_{n'=1}^{n-1} K_{n,n'} P_{n'}, \quad (4.76)$$

com

$$K_{n,n} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\gamma_i}{k_i} \right)^2, \quad (4.77)$$

uma vez que $g_{-1}^{(i)} = 1$, para todo $i = 1, 2, \dots, N$. Os resultados acima das expressões (4.77) e (4.76) levados no mapa (4.55) implicam:

$$P_{n+1} = \left[1 - \sum_{i=1}^N \left(\frac{\gamma_i}{k_i} \right)^2 \right] P_n - \frac{\partial v_{\text{efetivo}}(X)}{\partial X} \Big|_{X=X_n} + F_n - \sum_{n'=1}^{n-1} K_{n,n'} P_{n'} - \sum_{i=1}^N \frac{\gamma_i^2}{k_i^2} g_{n-1} X_0, \quad (4.78)$$

de maneira que o determinante da matriz jacobiana associada ao sistema forneça $\det(D\mathcal{M}_{\text{sistema}}) = 1 - \sum_{i=1}^N \left(\frac{\gamma_i}{k_i} \right)^2$ e não apenas 1 como no caso conservativo (ou para $\gamma_i = 0$), sendo $D\mathcal{M}_{\text{sistema}}$ a matriz jacobiana associada ao sistema somente. De fato, esta é a taxa de contração do volume no espaço de fases (X, P) . É evidente que esta taxa de dissipação na expressão (4.78) depende apenas do número de osciladores, do parâmetro de acoplamento e da distribuição de frequências para o banho. Nestes termos, a dissipação depende de propriedades específicas somente do meio.

4.5 A influência dos impulsos periódicos no ambiente

Frente aos resultados apresentados e essencialmente à forma não-usual de flutuação-dissipação, podemos questionar se este comportamento é uma propriedade intrínseca do mapa que propusemos ou é um efeito puramente dos impulsos periódicos.

Uma maneira de efetuarmos esta análise se dá através do estudo da influência do banho com impulsos periódicos. É bem conhecido o espaço de fases de um oscilador harmônico clássico, onde as trajetórias correspondem a elipses, de maneira muito similar a que apresentamos para o oscilador harmônico a tempo discreto. Contudo, mostramos que o semi-eixo maior das elipses não se encontra paralelo ao eixo das abcissas: faz um ângulo de $\phi = \pi/4$ rad. Se o efeito do “kick” é de rotacionar as órbitas no espaço de fases, então, por hipótese, o termo adicional (4.75) que aparece na relação de flutuação-dissipação (4.74) deve se anular para uma escolha de coordenadas onde o semi-eixo maior da elipse não esteja mais rotacionado em relação às novas abcissas.

O procedimento utilizado para tanto consiste em tomar a matriz rotação para um sistema de coordenadas [47], definida por:

$$R(\phi) = \begin{bmatrix} \cos(\phi) & \text{sen}(\phi) \\ -\text{sen}(\phi) & \cos(\phi) \end{bmatrix}. \quad (4.79)$$

A figura 4.5 ilustra a rotação de um sistema de coordenadas de maneira que os eixos das ordenadas e abscissas coincidam com os semi-eixos da elipse.

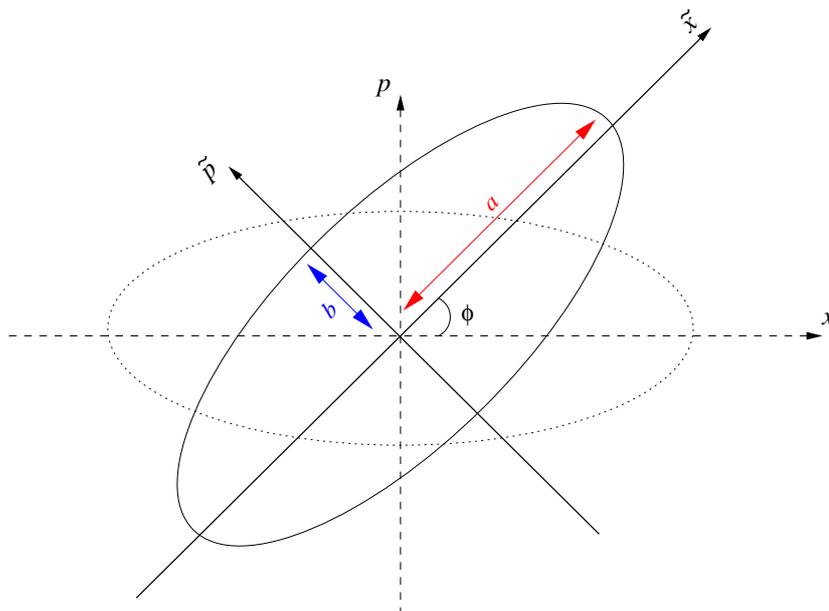


Figura 4.5: Representação esquemática da mudança de coordenadas através de uma rotação por ângulo ϕ . Na figura mostramos também os semi-eixos maior, a , e menor, b .

Como os mapas se encontram na forma adimensional, então a situação descrita pela figura 4.5 é representada matematicamente por meio da matriz rotação (4.79):

$$\begin{pmatrix} \tilde{x}_n \\ \tilde{p}_n \end{pmatrix} = R(\phi) \begin{pmatrix} x_n \\ p_n \end{pmatrix}, \quad (4.80)$$

com $(\tilde{x}_n, \tilde{p}_n)$ denotando o par conjugado posição-momentum no espaço de fases rotacionado por um ângulo ϕ . Considerando que DM é a matriz jacobiana do mapa dado pelas expressões (4.24) e (4.25), então podemos representar o mapa harmônico na forma matricial:

$$\begin{pmatrix} x_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = DM \begin{pmatrix} x_n \\ p_n \end{pmatrix}, \quad (4.81)$$

de modo que possamos fazer

$$R(\phi) \begin{pmatrix} x_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = R(\phi)(DM)I \begin{pmatrix} x_n \\ p_n \end{pmatrix} \quad (4.82)$$

ou ainda

$$\begin{pmatrix} \tilde{x}_{n+1} \\ \tilde{p}_{n+1} \end{pmatrix} = R(\phi)(DM)R^{-1}(\phi) \begin{pmatrix} \tilde{x}_n \\ \tilde{p}_n \end{pmatrix}, \quad (4.83)$$

pois $I = R^{-1}(\phi)R(\phi)$ corresponde à matriz identidade.

O cálculo de $R(\phi)(DM)R^{-1}(\phi)$ fornece o mapa harmônico nas coordenadas rotacionadas, onde esperamos que as órbitas correspondam a elipses cujos semi-eixos coincidem com os eixos das ordenadas e abcissas do sistema de coordenadas.

Com efeito, o mapa harmônico rotacionado, considerando $\gamma_i \neq 0$ é escrito como segue:

$$\tilde{x}_{n+1}^{(i)} = \left(1 + \frac{k_i}{2}\right) k_i \tilde{p}_n^{(i)} + \left(1 - \frac{k_i^2}{2}\right) \tilde{x}_n^{(i)} + \frac{\gamma_i}{\sqrt{2}} \frac{(1 + k_i)}{k_i} X_n, \quad (4.84)$$

$$\tilde{p}_{n+1}^{(i)} = \left(1 - \frac{k_i^2}{2}\right) \tilde{p}_n^{(i)} - \left(1 - \frac{k_i}{2}\right) k_i \tilde{x}_n^{(i)} + \frac{\gamma_i}{\sqrt{2}} \frac{(1 - k_i)}{k_i} X_n. \quad (4.85)$$

O espaço de fases do mapa harmônico para $\gamma_i = 0$ é mostrado na figura 4.6 para uma única condição inicial.

A constante de movimento nestas coordenadas passa a ser:

$$\mathcal{H}_i(\tilde{x}, \tilde{p}) = \left(\frac{1}{2} - \frac{k_i}{4}\right) \tilde{x}^2 + \left(\frac{1}{2} + \frac{k_i}{4}\right) \tilde{p}^2. \quad (4.86)$$

Ainda com o intuito de verificarmos a hipótese lançada no início desta seção, vamos considerar uma distribuição canônica, a exemplo do que foi feito na seção anterior, porém agora com a forma não rotacionada da hamiltoniana, equação (4.86):

$$\rho(\tilde{x}_0, \tilde{p}_0) = \mathcal{Z}_C^{-1} e^{-\beta \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i(\tilde{x}_0, \tilde{p}_0)}. \quad (4.87)$$

É de se esperar que a nova função partição não se altere, pois se trata da mesma distribuição, apesar de escrita em coordenadas rotacionadas. De fato:

$$\mathcal{Z}_C = \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^N \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{1 - k_i^2/4}},$$

isto é, $\mathcal{Z}_C = Z_C$.

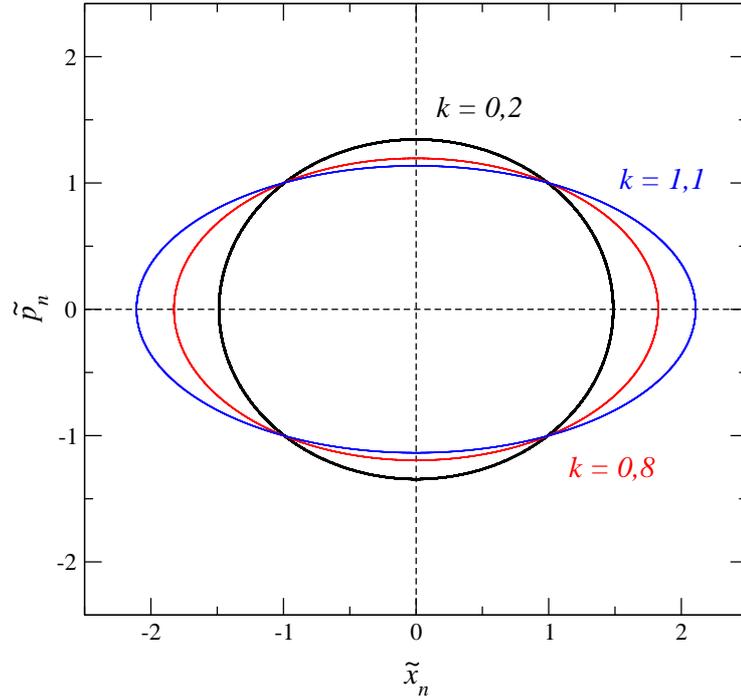


Figura 4.6: Espaço de fases para uma única condição inicial $(\tilde{x}_0, \tilde{p}_0) = (1, 1)$ com a variação do parâmetro k .

Podemos empregar o mesmo raciocínio utilizado para solucionarmos o mapa do banho para obtermos as soluções do sistema rotacionado com $\gamma = 0$. Um modo simples e elegante de efetuar isto é escrevermos as soluções (4.39) e (4.40) na forma matricial. Posteriormente, aplicamos a matriz rotação no vetor (x_n, p_n) de maneira que obtemos diretamente:

$$\tilde{x}_n^{(i)} = \tilde{x}_0^{(i)} \cos(n\theta_i) + \sqrt{\frac{2+k_i}{2-k_i}} \tilde{p}_0^{(i)} \sin(n\theta_i), \quad (4.88)$$

$$\tilde{p}_n^{(i)} = -\sqrt{\frac{2-k_i}{2+k_i}} \tilde{x}_0^{(i)} \sin(n\theta_i) + \tilde{p}_0^{(i)} \cos(n\theta_i). \quad (4.89)$$

É possível ainda procedermos como fizemos para o caso $\gamma \neq 0$ do sistema original, cujas elipses estão rotacionadas por um ângulo $\phi \neq 0$. Os novos coeficientes das soluções rotacionadas, equações (4.88) e (4.89) se escrevem:

$$\tilde{g}_n^{(i)} = \cos[(n+1)\theta_i], \quad (4.90)$$

$$\tilde{f}_n^{(i)} = \sin[(n+1)\theta_i]. \quad (4.91)$$

Na tabela 4.2 podemos conferir os coeficientes de $\{X_{n'}\}_{n'=0}^2$, nas três primeiras iteradas da coordenada de posição do mapa do banho (4.84) com $\gamma \neq 0$.

Tabela 4.2: Os coeficientes das primeiras iteradas do mapa harmônico, dado pelos mapeamentos (4.84) e (4.85), acoplado ao sistema central.

n	X_0	X_1	X_2
1	$1 + k$	0	0
2	$1 + 2k - k^2 - k^3$	$1 + k$	0
3	$1 + 3k - 3k^2 - 4k^3 + k^4 + k^5$	$1 + 2k - k^2 - k^3$	$1 + k$

A combinação dos resultados (4.88), (4.89) e (4.90), (4.91) para $\gamma = 0$, aliada a uma inspeção cuidadosa da tabela 4.2, nos permite escrever:

$$\begin{aligned} \tilde{x}_n^{(i)} &= \tilde{x}_0^{(i)} \tilde{g}_{n-1}^{(i)} + \sqrt{\frac{2+k_i}{2-k_i}} \tilde{p}_0^{(i)} \tilde{f}_{n-1}^{(i)} \\ &+ \frac{\gamma_i}{\sqrt{2k_i}} \sum_{n'=0}^{n-1} X_{n'} \left(\tilde{g}_{n-n'-1}^{(i)} + \sqrt{\frac{2+k_i}{2-k_i}} \tilde{f}_{n-n'-1}^{(i)} \right), \end{aligned} \quad (4.92)$$

$$\begin{aligned} \tilde{p}_n^{(i)} &= -\sqrt{\frac{2-k_i}{2+k_i}} \tilde{x}_0^{(i)} \tilde{f}_{n-1}^{(i)} + \tilde{p}_0^{(i)} \tilde{g}_{n-1}^{(i)} \\ &+ \frac{\gamma_i}{\sqrt{2k_i}} \sum_{n'=0}^{n-1} X_{n'} \left(\tilde{g}_{n-n'-1}^{(i)} - \sqrt{\frac{2-k_i}{2+k_i}} \tilde{f}_{n-n'-1}^{(i)} \right). \end{aligned} \quad (4.93)$$

De posse agora da solução do banho, desejamos efetuar os mesmos procedimentos para a obtenção de um mapa generalizado, porém agora com o banho escrito em coordenadas rotacionadas. Com esta finalidade, notemos que na relação de recorrência para o momentum do sistema (4.20) do mapa proposto neste trabalho tem termo de acoplamento dependente de $x_n^{(i)}$, a posição de cada um dos osciladores do banho. Escrita nas novas coordenadas rotacionadas, a posição dos osciladores do banho é determinada por: $x_n^{(i)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{x}_n^{(i)} - \tilde{p}_n^{(i)})$, que equivale à aplicação da matriz rotação inversa.

Explicitamente temos que:

$$\begin{aligned} x_n^{(i)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left(\tilde{g}_{n-1}^{(i)} + \sqrt{\frac{2-k_i}{2+k_i}} \tilde{f}_{n-1}^{(i)} \right) \tilde{x}_0^{(i)} + \left(\sqrt{\frac{2+k_i}{2-k_i}} \tilde{f}_{n-1}^{(i)} - \tilde{g}_{n-1}^{(i)} \right) \tilde{p}_0^{(i)} \right] \\ &+ \frac{\gamma_i}{\sqrt{1-k_i^2/4}} \sum_{n'=0}^{n-1} X_{n'} \tilde{f}_{n-n'-1}^{(i)}. \end{aligned} \quad (4.94)$$

Substituindo a posição (4.94) na relação do momentum do sistema (4.20) conduz a:

$$\begin{aligned}
P_{n+1} &= P_n - \frac{\partial v(X)}{\partial X} \Big|_{X=X_n} + \sum_{i=1}^N \gamma_i \left(\frac{\tilde{x}_n - \tilde{p}_n}{\sqrt{2}} \right) \\
&= P_n - \frac{\partial v(X)}{\partial X} \Big|_{X=X_n} + \sum_{i=1}^N \frac{\gamma_i}{\sqrt{2}} \left[\left(\tilde{g}_{n-1}^{(i)} + \sqrt{\frac{2-k_i}{2+k_i}} \tilde{f}_{n-1}^{(i)} \right) \tilde{x}_0^{(i)} \right. \\
&\quad \left. + \left(\sqrt{\frac{2+k_i}{2-k_i}} \tilde{f}_{n-1}^{(i)} - \tilde{g}_{n-1}^{(i)} \right) \tilde{p}_0^{(i)} \right] + \sum_{i=1}^N \frac{\gamma_i^2}{\sqrt{1-k_i^2/4}} \sum_{n'=0}^{n-1} X_{n'} \tilde{f}_{n-n'-1}^{(i)} \\
&= P_n - \frac{\partial v(X)}{\partial X} \Big|_{X=X_n} + \tilde{F}_n + \sum_{i=1}^N \frac{\gamma_i}{\sqrt{1-k_i^2/4}} \sum_{n'=0}^{n-1} X_{n'} \tilde{f}_{n-n'-1}^{(i)}. \tag{4.95}
\end{aligned}$$

No mapa (4.95) definimos a força flutuante nas novas coordenadas como sendo:

$$\tilde{F}_n \equiv \sum_{i=1}^N \frac{\gamma_i}{\sqrt{2}} \left[\left(\tilde{g}_{n-1}^{(i)} + \sqrt{\frac{2-k_i}{2+k_i}} \tilde{f}_{n-1}^{(i)} \right) \tilde{x}_0^{(i)} + \left(\sqrt{\frac{2+k_i}{2-k_i}} \tilde{f}_{n-1}^{(i)} - \tilde{g}_{n-1}^{(i)} \right) \tilde{p}_0^{(i)} \right]. \tag{4.96}$$

Com o auxílio da distribuição (4.87) temos:

$$\langle \tilde{x}_0^{(i)} \rangle = 0 \tag{4.97}$$

$$\langle \tilde{p}_0^{(i)} \rangle = 0 \tag{4.98}$$

$$\langle \tilde{x}_0^{(i)2} \rangle = \frac{1/\beta}{1-k_i/2} \tag{4.99}$$

$$\langle \tilde{p}_0^{(i)2} \rangle = \frac{1/\beta}{1+k_i/2}, \tag{4.100}$$

o que implica

$$\langle \tilde{F}_n \rangle = 0, \tag{4.101}$$

para a força flutuante.

A função de autocorrelação, embora bastante trabalhosa, possui termos cruzados que se anulam devido à média, como $\langle \tilde{x}_0^{(i)} \tilde{p}_0^{(i)} \rangle = 0$. Contudo, seu valor é igual ao obtido para a força flutuante dada pela equação (4.70), isto é,

$$\langle \tilde{F}_n \tilde{F}_{n'} \rangle = \langle F_n F_{n'} \rangle.$$

O termo remanescente, correspondente à soma das contribuições do núcleo de memória e da dissipação, na expressão (4.95) se encontra na soma dos termos: $\sum_{n'} X_{n'} \tilde{f}_{n-n'-1}^{(i)}$. Contudo, não há uma forma para $\tilde{f}_{n-n'-1}^{(i)}$ que dependa apenas de \tilde{f}_n . Como consequência,

novamente uma forma não-usual da relação de flutuação-dissipação é satisfeita, o que nos permite afirmar que não é a rotação das trajetórias devido ao “kick” a responsável pela forma (4.74).

4.6 A dinâmica de uma partícula livre no ambiente finito com impulsos periódicos

Como um exemplo, vamos tomar o caso da partícula livre, em que $v(X) = 0$ nas expressões (4.78) e (4.56). Para este caso, a discretização da equação de Langevin clássica é conhecida: o processo é assumido ser markoviano e as expressões para a velocidade e posição são obtidas [48].

Neste exemplo, desconsideraremos efeitos de memória, de modo que as expressões (4.78) e (4.56) possam ser escritas como:

$$P_{n+1} = \lambda P_n + F_n, \quad (4.102)$$

$$X_{n+1} = X_n + P_{n+1}, \quad (4.103)$$

onde chamamos

$$\lambda \equiv 1 - \sum_{i=1}^N \left(\frac{\gamma_i}{k_i} \right)^2 \quad (4.104)$$

como sendo a constante de dissipação.

A razão pela qual podemos desconsiderar termos de memória para este exemplo, é que se trata de uma aplicação particular do mapa generalizado proposto, uma vez que é um mapa geral, para o qual não são impostas restrições. Também no mapa (4.78) há o aparecimento do termo de força correspondente a uma soma dependente da condição inicial X_0 . Conforme comentamos no caso contínuo, aqui também podemos fazer $X_0 = 0$, o que representa o fato de que não há interação entre banho e sistema no instante $n = 0$.

Assumimos aqui também que o resultado (4.65) é válido. Contudo, para a correlação, assumimos o processo markoviano:

$$\langle F_n F_{n'} \rangle = C \delta_{n,n'}, \quad (4.105)$$

sendo a delta de Kronecker e C , dada à partir da expressão (4.70), que depende do número

de osciladores, do acoplamento e da densidade espectral do banho térmico,

$$C = \sum_{i=1}^N \frac{\gamma_i^2}{\beta k_i^2 (1 - k_i^2/4)}. \quad (4.106)$$

Podemos observar as primeiras iteradas do mapa (4.102) e (4.103) com a finalidade de encontrarmos uma solução em termos apenas de uma soma de variáveis independentes. A tabela 4.3 mostra as três primeiras iteradas do “mapa browniano”, onde consideramos, por simplicidade, as condições iniciais $X_0 = 0$ e $P_0 = 0$, sem restrições de generalidade.

Tabela 4.3: As três primeiras iteradas do mapa browniano, expressões (4.102) e (4.103).

n	X_n	P_n
1	F_0	F_0
2	$(1 + \lambda)F_0 + F_1$	$\lambda F_0 + F_1$
3	$(1 + \lambda + \lambda^2)F_0 + (1 + \lambda)F_1 + F_2$	$\lambda^2 F_0 + \lambda F_1 + F_2$

Como λ é constante e depende apenas do número de osciladores e $\{F_n\}$ são assumidos serem independentes, o que é expresso pela condição (4.105), então podemos escrever para o momentum:

$$P_n = \sum_{l=0}^{n-1} \lambda^l F_{n-l-1}, \quad (4.107)$$

e corresponde à solução para o momentum, expressa em termos da soma apenas das variáveis independentes $\{F_n\}$.

Também com alguma manipulação algébrica, após estudo das iteradas pela tabela 4.3, chegamos a solução para a posição:

$$X_n = \sum_{l=0}^{n-1} \frac{1}{K_{n,n}} (1 - \lambda^{l+1}) F_{n-l-1}, \quad (4.108)$$

que também é escrita em termos de uma soma de variáveis independentes, dado que $K_{n,n}$ e λ são constantes e $\{F_n\}$ consiste do conjunto das forças flutuantes discretas, atuantes em cada tempo n .

Podemos agora investigar a difusão tanto na posição quanto no momentum. Para isto, vamos considerar a abordagem de [48]. Inicialmente vamos determinar a função característica associada ao momentum, definida como sendo o valor médio da transformada de

Fourier da solução (4.107):

$$G_n(\kappa; P_n) \equiv \langle e^{i\kappa P_n} \rangle = \prod_{l=0}^{n-1} \langle e^{i\kappa \lambda^l F_{n-l-1}} \rangle \quad (4.109)$$

$$= \exp \left[-\frac{\kappa^2 \langle F_n^2 \rangle}{2} \sum_{l=0}^{n-1} \lambda^{2l} \right]. \quad (4.110)$$

A soma no argumento da exponencial da expressão (4.110) é convergente e possui resultado conhecido igual a $\sum_l \lambda^{2l} = \frac{1-\lambda^{2n}}{1-\lambda^2}$.

Como consequência, podemos calcular a função densidade de probabilidade, definida como sendo a transformada de Fourier inversa da função característica. Matematicamente:

$$\rho(P_n) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G_n(\kappa; P_n) e^{-i\kappa P_n} d\kappa \quad (4.111)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi b_n}} e^{-P_n^2/2b_n}, \quad (4.112)$$

e corresponde a uma distribuição gaussiana no momentum, um resultado similar ao obtido para o movimento browniano.

Com efeito, o cálculo dos dois primeiros momentos da densidade de probabilidade fornecem:

$$\langle P_n \rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(P_n) P_n dP_n = 0, \quad (4.113)$$

$$\langle P_n^2 \rangle = b_n = \langle F_n^2 \rangle \frac{1-\lambda^{2n}}{1-\lambda^2} = \langle F_n^2 \rangle \frac{1-(1-\gamma^2)^{2n}}{1-(1-\gamma^2)^2}, \quad (4.114)$$

sendo γ o parâmetro de acoplamento entre sistema e banho.

Para a posição, a função característica se escreve:

$$G_n(\kappa; X_n) = \prod_{l=0}^{n-1} \left\langle \exp \left[\frac{i\kappa}{K_{n,n}} (1 + \lambda^{l+1}) F_{n-l-1} \right] \right\rangle = e^{-\kappa^2 d_n/2}, \quad (4.115)$$

com

$$d_n = \frac{\langle F_n^2 \rangle}{K_{n,n}^2} \left[\frac{2\lambda - 2\lambda^{n+1} - 2\lambda^{2+n} + \lambda^{2+2n} - n + (n+1)\lambda^2}{\lambda^2 - 1} \right]. \quad (4.116)$$

Desta maneira, a densidade de probabilidade para a posição fica:

$$\rho(X_n) = \frac{e^{-X_n^2/2d_n}}{\sqrt{2\pi d_n}}, \quad (4.117)$$

cujos dois primeiros momentos são:

$$\langle X_n \rangle = 0 \quad (4.118)$$

$$\langle X_n^2 \rangle = d_n, \quad (4.119)$$

como esperado de uma distribuição gaussiana.

Com efeito, para o número de iteradas $n \rightarrow \infty$ e considerando $0 < \lambda < 1$, temos para a difusão espacial $d_n \sim Dn$, com D sendo o coeficiente de difusão dado por:

$$D = \frac{\langle F_n^2 \rangle}{K_{n,n}^2}. \quad (4.120)$$

A diferença em relação a outras abordagens de discretização, deste mesmo exemplo, é que consideramos aqui o efeito do banho térmico explicitamente. Assim, o coeficiente de difusão depende da densidade espectral do banho e do parâmetro de acoplamento. Entretanto, o nosso resultado para d_n e b_n em tempos longos coincidem com os resultados conhecidos para o movimento browniano.

Um estudo numérico do mapa proposto por nós com resultados que confirmam nossos cálculos analíticos serão apresentados no próximo capítulo.

As simulações numéricas

Neste capítulo vamos investigar as propriedades de sistemas específicos imersos em banho harmônico com “kick”. Sabemos que a equação que governa o sistema central a tempo contínuo é a equação de Langevin. Em nosso modelo temos a presença dos impulsos periódicos (“kicks”). Logo, a evolução do sistema com o número de iteradas é dado pelo que chamamos de mapa generalizado, dado pelas relações de recorrência (4.55) e (4.56).

Embora de posse da equação que governa o movimento do sistema, nosso interesse neste capítulo é em situações mais específicas e potenciais mais complexos, de modo que tenhamos acesso aos fenômenos que ocorrem por meio de investigação numérica. Este é o caso, por exemplo, de um potencial que implique movimento caótico. Também temos interesse aqui em calcular numericamente algumas quantidades específicas já encontradas analiticamente no capítulo anterior.

Para efetuarmos as simulações, precisamos considerar uma distribuição de frequências para o banho de osciladores, seja o banho constituído por osciladores harmônicos ou osciladores harmônicos com “kicks”. Destinaremos a seção seguinte para a discussão sobre a escolha da distribuição das frequências do banho, ou, na nossa escala, o parâmetro adimensional das frequências k_i .

5.1 A densidade espectral do banho

Ao efetuarmos as simulações numéricas considerando o banho térmico como N mapas harmônicos, precisamos especificar os seus parâmetros associados à frequência.

Conforme definimos, o que chamamos de mapa harmônico adimensional apresenta

um parâmetro $k_i = \omega_i \tau$ que é proporcional ao período do impulso e à frequência de oscilação. Portanto, precisamos delimitar como serão escolhidos os valores de k_i para cada oscilador do banho térmico ($i = 1, 2, \dots, N$). Na prática, teremos um espectro de frequências discreto, no sentido de que a distribuição de frequências será dada por uma função contínua no limite $N \rightarrow \infty$.

Quando um número aleatório é gerado por meio de uma distribuição constante, é possível atribuímos uma densidade de probabilidade à distribuição. Deste modo, se $\mathcal{P}(x)dx$ é a probabilidade de gerar um número entre x e $x + dx$, então podemos escrever:

$$\mathcal{P}(x)dx = \begin{cases} dx, & \text{se } 0 < x < 1 \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (5.1)$$

Sendo a distribuição normalizada, teremos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{P}(x)dx = 1. \quad (5.2)$$

Dada uma distribuição para os números, desejamos que os números aleatórios se distribuam de acordo com alguma potência diferente de zero, o que dará outra distribuição ao invés de constante para as frequências do banho.

Colocado em outros termos, desejamos obter uma forma funcional $y(x)$ para as frequências do banho, de modo que ao gerarmos os números aleatórios para x , tenhamos a distribuição de probabilidade da nova variável y tal que:

$$\mathcal{P}(y)dy = \begin{cases} y^\alpha dy, & \text{se } 0 < y < 1 \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (5.3)$$

A lei de transformação de probabilidades se escreve:

$$|\mathcal{P}(x)dx| = |\mathcal{P}(y)dy|, \quad (5.4)$$

o que fornece

$$y(x) = [(\alpha + 1)x]^{\frac{1}{\alpha+1}}. \quad (5.5)$$

Aplicada ao problema da escolha das frequências do banho, a densidade de probabi-

lidade dos parâmetros de frequências será dada por:

$$\rho(k) = k^\alpha. \quad (5.6)$$

Procedendo da forma acima descrita, temos a liberdade para escolhermos distintas distribuições de frequência, de maneira a estudarmos a influência destas distribuições nas quantidades mensuráveis do sistema.

Para o problema do sistema imerso em banho estudado nesta tese, a densidade espectral é definida por uma função $J(\omega)$. Em nossa escala, a densidade espectral passa a ser uma função do parâmetro de frequência k :

$$J(k) = \frac{\pi}{2} \sum_{i=1}^N \frac{\gamma_i^2}{k_i} \delta(k - k_i). \quad (5.7)$$

Quando assumimos um contínuo de osciladores ($N \rightarrow \infty$), então podemos assumir uma função contínua para a densidade espectral, da forma $J(k) = ck^\alpha$, sendo c uma constante. Neste contexto, é possível classificarmos a distribuição de frequências do banho da seguinte maneira de acordo com a potência da densidade espectral[10, 31]:

- $\alpha < 1$: banho do tipo sub-ôhmico;
- $\alpha = 1$: banho do tipo ôhmico;
- $\alpha > 1$: banho do tipo super-ôhmico;
- $\alpha = 2$: banho do tipo Debye.

Na figura 5.1, apresentamos a distribuição das frequências para um banho do tipo Debye, à medida que o número de osciladores cresce.

Em particular, adotaremos uma distribuição quadrática em todas as simulações numéricas efetuadas nesta tese.

5.2 A determinação das condições iniciais

Para escolher as condições iniciais, devemos ter em vista que a energia efetiva total do problema deve ser constante. Seja E a energia efetiva total do problema e E_S , E_B , E_I as energias efetivas do sistema, banho e interação, respectivamente. Dizer que a energia

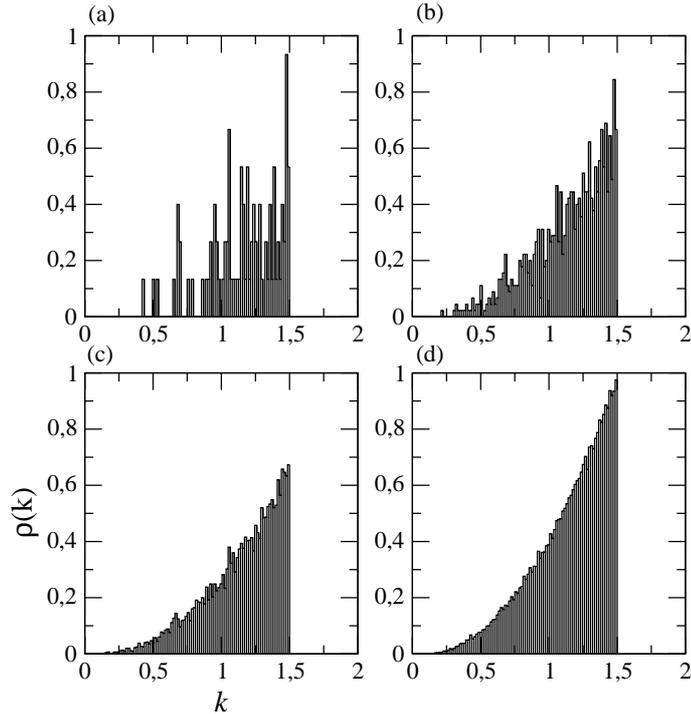


Figura 5.1: As frequências do banho seguem uma distribuição do tipo Debye, isto é, com $\alpha = 2$, no limite $N \rightarrow \infty$. Mostramos aqui as distribuições de frequência geradas através da relação 5.6, com $\alpha = 2$, para (a) $N = 100$, (b) $N = 1000$, (c) $N = 10000$ e (d) $N = 100000$ osciladores.

efetiva total E deve ser constante, equivale a fixar $E = E_S + E_B + E_I$ se estivermos interessados em várias realizações para o banho ou para o sistema. Note que esta energia efetiva é uma quantidade distinta da hamiltoniana original 4.1 do modelo proposto, pois a hamiltoniana apresenta dependência temporal explícita devido aos impulsos periódicos. Deste modo, existem flutuações em H , sendo conveniente olharmos para E conforme definimos. No caso do banho, já mostramos no capítulo 4 que esta quantidade para um único oscilador é a constante de movimento $h(x, p)$ dada pela expressão (4.14). Consequentemente, a soma estendida a todos os osciladores com “kick”, fornecerá a energia efetiva do banho.

Outro aspecto que devemos considerar é que exatamente quando escolhermos a condição inicial não há interação entre sistema e banho. Isto pode ser realizado com a escolha da posição do sistema em $X = 0$, dado que a interação é bilinear nas coordenadas do banho e do sistema.

Para a escolha das condições iniciais, utilizamos um gerador de números aleatórios, como o `ran1` [49], que possui distribuição constante e normalizada, de modo a gerar as condições iniciais para o momentum de cada oscilador. O i -ésimo oscilador tem energia efetiva inicial $E_B^{(i)}$, de forma que $\sum_{i=1}^N E_B^{(i)}$ forneça a energia efetiva total somente do

banho.

Resolvendo a constante (4.14) para $x_0^{(i)}$, o i -ésimo oscilador de energia $E_B^{(i)}$, vem:

$$x_0^{(i)} = \frac{k_i}{2} p_0^{(i)} \pm \sqrt{2E_B^{(i)} - p_0^{(i)2} (1 - k_i^2/4)}. \quad (5.8)$$

Dado que $p_0^{(i)}$ foi escolhido aleatoriamente, então numericamente basta verificarmos se a raiz é positiva em (5.8) e, então, escolhermos $x_0^{(i)}$ quando isto for verdade.

Outro aspecto que devemos comentar é que, em se tratando de um mapa, não há restrição para a escolha das condições iniciais, desde que os pontos escolhidos pertençam, evidentemente, ao domínio onde o mapa está definido. Esta forma que citamos acima consiste em escolher as condições iniciais aleatórias de modo que estejam todas sobre a mesma superfície de energia E_B para o banho, com a finalidade de estudarmos as trocas de energia entre o sistema e o banho. Outra forma de inicialização consiste em distribuir as energias efetivas $E_B^{(i)}$ para cada oscilador de acordo com a distribuição de Boltzmann do tipo $e^{-\beta E}$, a uma dada temperatura fixa. Quando isto for feito neste capítulo, geralmente assumiremos $\beta = 1$.

5.3 O mapa generalizado e o movimento browniano

Encerramos o capítulo 4 com a seção 4.6, onde apresentamos os cálculos analíticos efetuados no sistema dinâmico a tempo discreto que chamamos de mapa generalizado. Em particular, derivamos expressões para a difusão, tanto para o momentum quanto para a posição de uma partícula browniana. Esta seção é dedicada à apresentação dos resultados numéricos para o que chamaremos de mapa browniano, correspondente ao conjunto de relações de recorrência dados pelas equações (4.102) e (4.103).

Similarmente ao que se faz no estudo do movimento browniano, a figura 5.2 apresenta a posição e o momentum para 10 condições iniciais distintas para o banho (em cores), embora com condição inicial igual para o sistema central.

Empregamos também neste capítulo o acoplamento efetivo, um resultado obtido da teoria da resposta linear [19]. Isto é feito nas simulações numéricas de modo a obter a resposta efetiva do banho. Matematicamente, emprega-se $\gamma_i \rightarrow \gamma_i/\sqrt{N}$.

É possível notar o comportamento extremamente similar do movimento browniano usual apenas com $N = 100$ osciladores. Para evidenciar o caráter pseudo-aleatório do

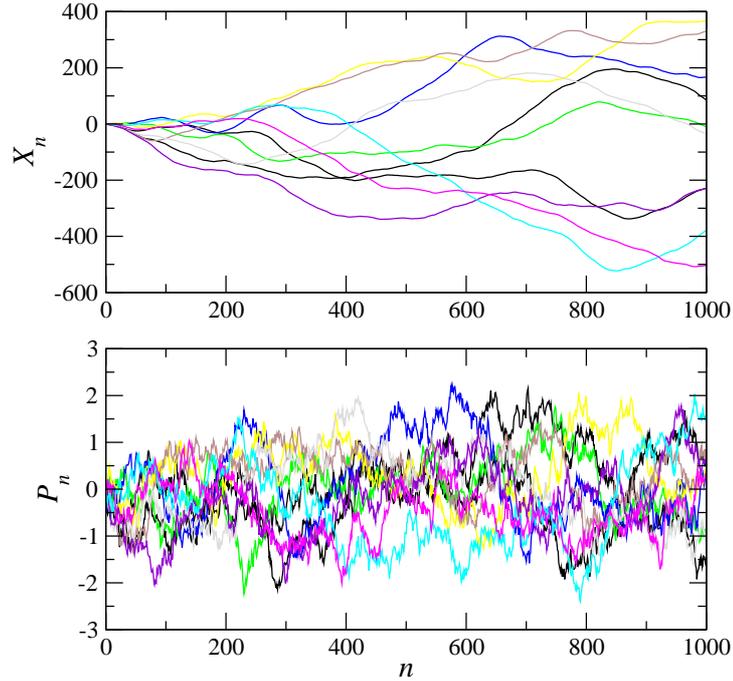


Figura 5.2: A posição X_n e o momentum P_n calculados numericamente para 10 condições iniciais, 10^3 iterações e $N = 100$ mapas harmônicos no banho. Cada cor denota uma trajetória para uma condição inicial dos mapas do banho, embora o sistema central seja inicializado em $(X_0, P_0) = (0, 0)$. Nestas figuras, $\gamma = 0, 1/\sqrt{N}$.

mapa proposto, bem como a verificação de nossas expressões analíticas para o caso browniano, é possível calcular numericamente a difusão, tanto para o momentum quanto para a posição, do sistema central, dado pelas expressões (4.114) e (4.116). Para a geração numérica dos gráficos da difusão, o mapa dado pelas equações (4.103) e (4.102) é calculado para 10^3 iterações e 10^3 condições iniciais do banho.

Em um processo difusivo, o segundo momento da distribuição da posição é proporcional a alguma potência do tempo:

$$\langle X^2 \rangle \sim n^\epsilon, \quad (5.9)$$

com $\epsilon = 1$ para a difusão normal.

Uma inspeção mais cuidadosa da difusão nos permite afirmar se o mapa é consistente para a geração de trajetórias brownianas. O gráfico 5.4 mostra que o expoente (5.9) é $\epsilon \approx 1,0$, o que caracteriza a difusão normal, para longos tempos $n > 2000$.

Este resultado é particularmente reconhecível da expressão analítica para a difusão, conforme comentamos no capítulo 4.

Podemos verificar claramente das figuras 5.3 e 5.4 que os resultados obtidos analítica-

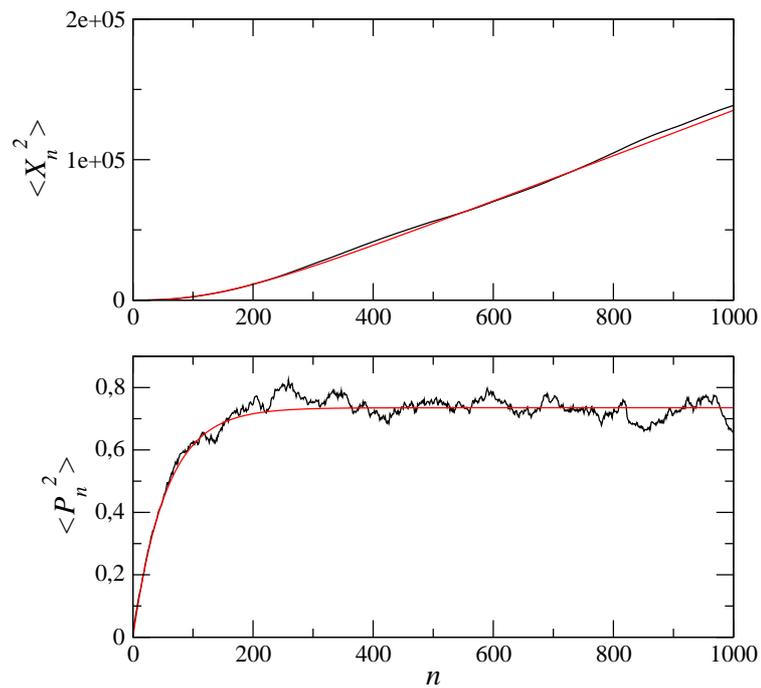


Figura 5.3: A difusão da posição e do momentum calculados numericamente (curva em preto) através do mapa (4.103) e (4.102) e analiticamente (curva em vermelho) das expressões (4.116) e (4.114). Para esta figuras, são utilizados: $\gamma = 0, 1/\sqrt{N}$, 10^3 condições iniciais e 10^3 iteradas.

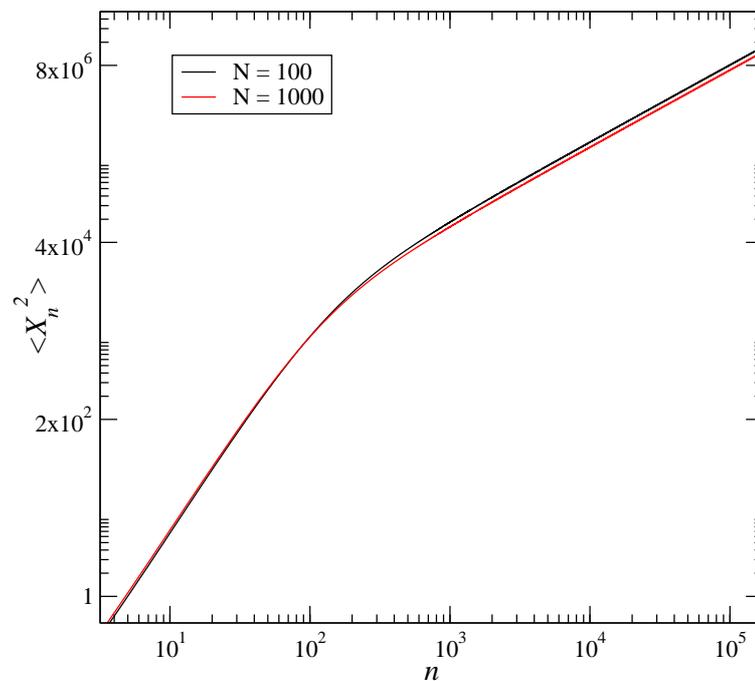


Figura 5.4: O desvio quadrático médio em escala *log-log* para $N = 100$ em preto e $N = 1000$ em vermelho, considerando $\gamma = 0, 1/\sqrt{N}$.

mente estão consistentes com os resultados numéricos para o caso de uma partícula livre no sistema sujeito a um banho de osciladores com “kick”.

Com o intuito de compreendermos os efeitos da memória no mapa, a mesma análise pode ser efetuada considerando termo a termo de memória. Consideremos o mapa de Langevin contendo apenas um termo de memória, isto é:

$$P_{n+1} = \lambda P_n + K_{n,n-1} P_{n-1} + F_n, \quad (5.10)$$

$$X_{n+1} = X_n + P_{n+1}, \quad (5.11)$$

de modo que tenhamos

$$\begin{aligned} \langle F_n \rangle &= 0, \\ \langle F_n F_{n-1} \rangle &= \sum_{i=1}^N \frac{\gamma_i^2}{k_i^2 (1 - k_i^2/4)} \cos(\theta_i), \\ \langle F_n F_{n-2} \rangle &= 0, \\ \langle F_n^2 \rangle &= \sum_{i=1}^N \frac{\gamma_i^2}{k_i^2 (1 - k_i^2/4)}. \end{aligned}$$

A figura 5.5 apresenta a difusão na posição do mapa do sistema central com um termo de memória. Novamente a inclinação da reta no gráfico *log-log* fornece $\epsilon \approx 1,0$.

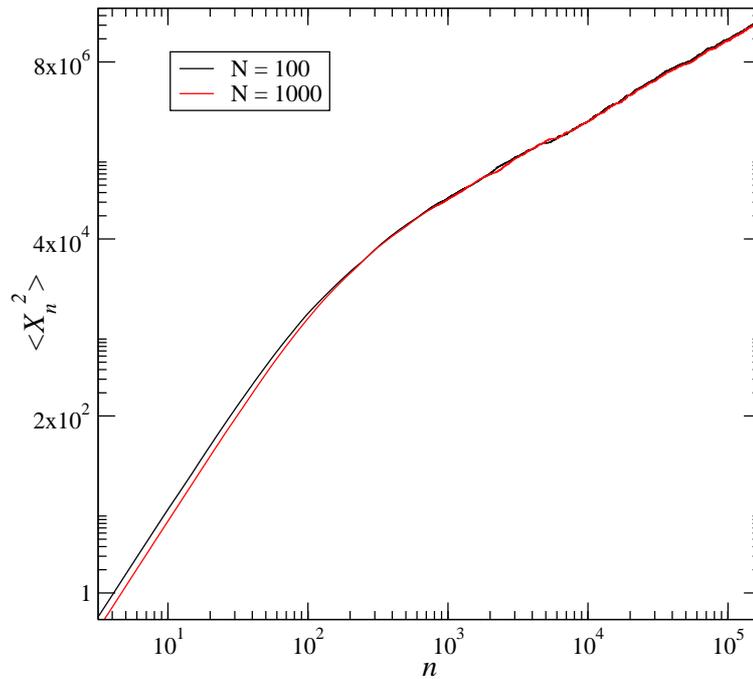


Figura 5.5: O desvio quadrático médio em escala *log-log* para $N = 100$ em preto e $N = 1000$ em vermelho, considerando $\gamma = 0,1/\sqrt{N}$.

Para tempos pequenos, no entanto, é possível perceber $\epsilon \approx 2,7$ nos dois casos, tanto markoviano quanto não-markoviano com um termo de memória.

5.4 O potencial harmônico para o sistema

Nesta seção, consideremos que o sistema central seja composto por uma partícula somente sujeita a um potencial do tipo harmônico. Neste caso, teremos na equação (4.20):

$$\frac{\partial v(X_n)}{\partial X_n} = \Omega X_n, \quad (5.12)$$

sendo Ω um parâmetro adimensional e proporcional à frequência de oscilação da partícula do sistema.

Matematicamente, temos para o sistema:

$$P_{n+1} = P_n - \Omega X_n + \sum_{i=1}^N \gamma_i x_n^{(i)}, \quad (5.13)$$

$$X_{n+1} = X_n + \Omega P_{n+1}. \quad (5.14)$$

Embora os efeitos da dissipação, memória e força flutuante estejam todos implícitos na soma que aparece sobre os osciladores na (5.13), poderíamos empregar para a evolução do momentum a expressão (4.78) nas investigações numéricas, onde temos explicitamente tais quantidades. No entanto, teríamos uma “frequência efetiva”, distinta de Ω , em razão do potencial efetivo. Em outras palavras, teríamos:

$$\frac{\partial v_{\text{efetivo}}(X_n)}{\partial X_n} = (\Omega - \gamma^2) X_n, \quad (5.15)$$

considerando $\gamma_i = \gamma$ igual para todos os osciladores. A frequência efetiva deste novo potencial é dada então por: $\Omega - \gamma^2$.

Quando escolhemos uma forma para o potencial, como neste caso, podemos estudar como ocorrem as trocas de energia entre o sistema e o banho. Em particular, em razão dos “kicks”, conforme já comentamos, a quantidade estudada deve ser uma constante de movimento quando não há acoplamento.

5.4.1 As trocas de energia entre o sistema e o banho

Como vimos, o mapa do sistema dado pelas equações (5.13) e (5.14), apresenta efeitos de dissipação, quando o escrevemos na forma do que chamamos mapa de Langevin. É natural esperarmos as trocas de energia entre sistema e banho com a variação do número de mapas que o compõe.

Uma evidência de que o sistema central apresenta dissipação, *i. e.* apresenta redistribuição da energia, quando estudado sob o ponto de vista de um sistema aberto, é dada na figura 5.6, que apresenta o espaço de fases somente do sistema para vários valores do parâmetro Ω em função do número de osciladores N do banho. É importante ressaltar que a energia efetiva inicial do sistema e do banho são fixas, sendo a energia efetiva de interação inicial nula. Para o sistema, fixamos $E_S = 1,0$ no gráfico da figura 5.6, de modo que a condição inicial para o sistema fosse: $(X_0, P_0) = (0, \sqrt{2})$ nas quatro situações mostradas.

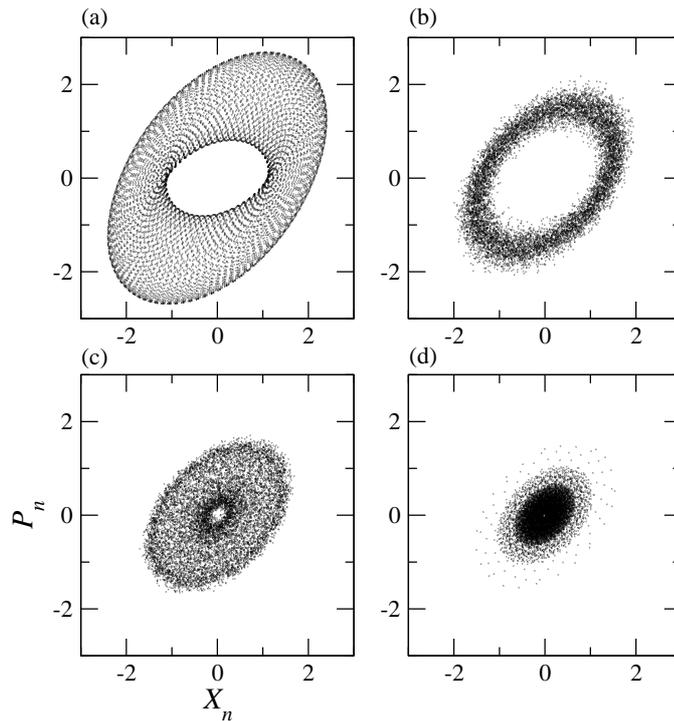


Figura 5.6: O espaço de fases somente do sistema central (X, P) com (a) $N = 1$, (b) $N = 10$, (c) $N = 100$ e (d) $N = 1000$. Nesta figura foi utilizado $\gamma_i = \gamma = 0,1/\sqrt{N}$ e $\Omega = 0,8$. A mesma condição inicial $(0, \sqrt{2})$ foi dada ao sistema central em todas as situações. Nesta figura, utilizamos 10^4 iteradas.

Ainda com base na figura 5.6, fixamos o parâmetro de frequência do sistema em $\Omega = 0,8$. Também vemos que as órbitas iniciadas em uma condição inicial (X_0, P_0) são atraídas para $(0,0)$, embora algumas não permaneçam lá, devido às trocas de energia

com o banho para N pequeno. Em termos da teoria de sistemas dinâmicos o ponto $(0, 0)$ representa um atrator, do ponto de vista somente do mapa harmônico que compõe o sistema central.

Para compreendermos como o parâmetro de frequência influencia na dinâmica do mapa generalizado, podemos estudar o espaço de fases somente do sistema com a variação deste parâmetro. A figura 5.7 apresenta o espaço de fases somente do sistema, para uma única condição inicial do sistema, a saber $(X_0, P_0) = (0, \sqrt{2})$, com $N = 100$ mapas harmônicos representando o banho.

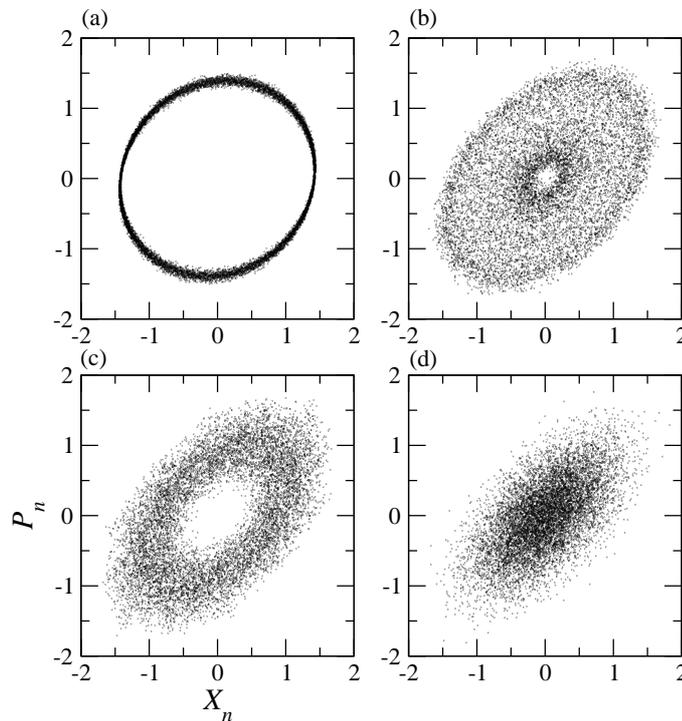


Figura 5.7: O espaço de fases somente do sistema central (X, P) com $N = 100$ foi construído com 10^4 iteradas do mapa harmônico como sistema central, imerso também em banho de mapas harmônicos. Aqui utilizamos $\gamma_i = \gamma = 0,1/\sqrt{N}$ e parâmetro associado à frequência do oscilador sendo (a) $\Omega = 0,2$; (b) $\Omega = 0,8$; (c) $\Omega = 1,0$ e (d) $\Omega = 1,2$. A mesma condição inicial foi dada ao sistema central em todas as situações.

Da figura 5.7, podemos perceber a influência do parâmetro de frequência. Algumas frequências para o sistema central apresentam maior dissipação. Isto se dá devido ao fato da frequência do sistema ser próxima de frequências associadas aos mapas do banho. De fato, se olharmos para a distribuição das frequências do banho na figura 5.1, veremos que as frequências do sistema próximas entre 1,0 e 1,5 é que fornecem maior dissipação, pois é a região mais provável para as frequências do banho.

O caráter dissipativo somente do sistema pode ser evidenciado a partir dos gráficos da energia efetiva do sistema com o número de iteradas. A energia efetiva para o sistema

harmônico (quando $\gamma_i = 0$) é dada por:

$$E_S = \frac{P^2}{2} + \frac{X^2}{2} - \frac{\Omega}{2}XP, \quad (5.16)$$

com Ω adimensional, conforme comentamos, e proporcional à frequência de oscilação da partícula do sistema e também proporcional ao tempo de “kick”.

Os gráficos para a energia efetiva do sistema E_S são mostrados na figura 5.8. Para a construção desta figura, seguimos apenas uma trajetória do sistema ao longo das 1000 iterações do mapa generalizado. As condições iniciais foram escolhidas aleatoriamente (cf. seção 5.2) para o banho de $N = 1, 10, 100$ mapas constituindo o ambiente.

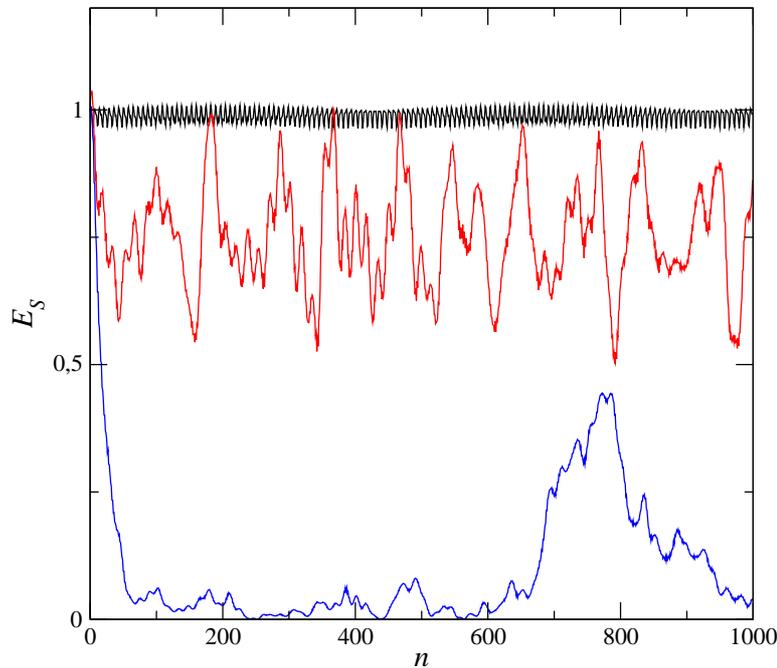


Figura 5.8: A energia efetiva do sistema. Para este gráfico empregamos $\Omega = 1, 2$, com $N = 1$ (curva preta), $N = 10$ (curva vermelha) e $N = 100$ (curva azul). Na figura são mostradas 10^3 iterações dos mapas, com $\gamma = 0, 1/\sqrt{N}$.

Da figura 5.8, é possível percebermos que com o aumento do número de osciladores, uma maior parte da energia do sistema é dissipada. De fato, o que ocorre é uma troca de energia com o ambiente, às custas da energia de interação. Neste exemplo da figura 5.8 fixamos a energia efetiva inicial do sistema como $E_S = 1,0$ e as condições iniciais do banho são determinadas da maneira descrita na seção 5.2, onde as energias de cada um dos elementos do banho são dadas por uma distribuição do tipo Boltzmann.

Cumpramos ressaltarmos que os picos que aparecem, tanto na curva vermelha quanto azul, apresentam alguma correlação. Por exemplo, na curva azul, há o aparecimento de

um pico entre $n = 700$ e $n = 800$. Na prática, estes picos reaparecerão para tempos maiores, em razão da recorrência de Poincaré.

Calculamos analiticamente a dissipação no capítulo anterior para o caso geral, de acordo com a expressão (4.78). Embora esta dissipação dependa apenas do número de osciladores e da distribuição de frequências, os termos de memória são responsáveis pelo efeito do retorno da energia.

Um olhar mais cuidadoso para as energias efetivas do sistema, banho e interação, E_S , E_B e E_I , respectivamente, nos mostra como se dá a troca dessas energias. Isto é o que podemos perceber na figura 5.9. Na simulação da figura 5.9 empregamos os mesmos valores da figura 5.8 para a inicialização do problema.

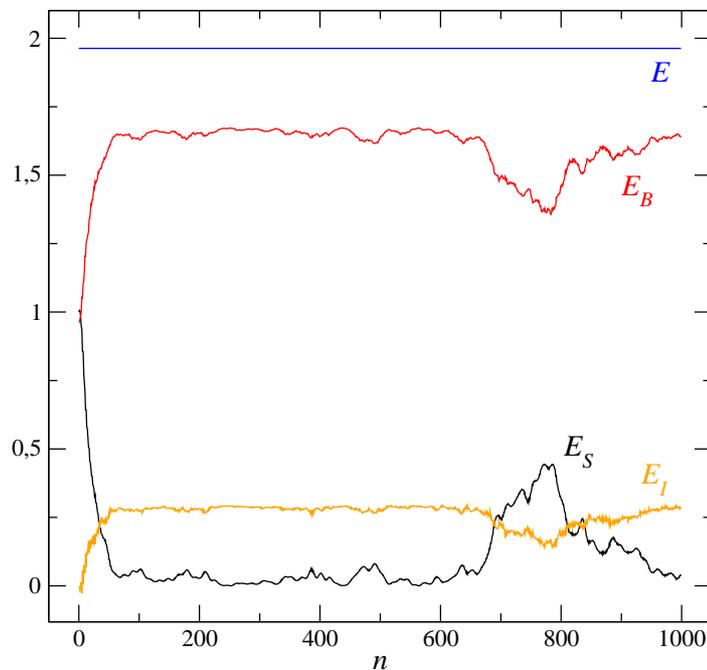


Figura 5.9: As trocas de energia. A curva em preto corresponde à energia efetiva do sistema central, em vermelho a energia efetiva do banho e em laranja a energia de interação. Em azul é mostrada a energia total do problema, que se conserva para $N = 100$ mapas no banho e 10^3 iterações.

Anteriormente, na figura 5.7, verificamos que existem frequências do sistema central que permitem uma taxa de dissipação maior. Por este motivo, a distribuição de frequências do banho influencia enormemente na taxa de dissipação. Um panorama global para a compreensão do problema é dado pela construção de um espaço de parâmetros.

Na figura 5.10 apresentamos o espaço dos parâmetros γ , Ω e E_S na escala de cores. Para esta simulação, tomamos $E_S = 10,0$ inicialmente e $E_B^{(i)} = 0,01$ para cada um dos $N = 2$ mapas do banho. Os parâmetros de frequência dos dois mapas são: $k_1 = 1,169495$

e $k_2 = 0,427077$, que correspondem às duas primeiras frequências obtidas do gerador aleatório, conforme descrito na seção 5.1.

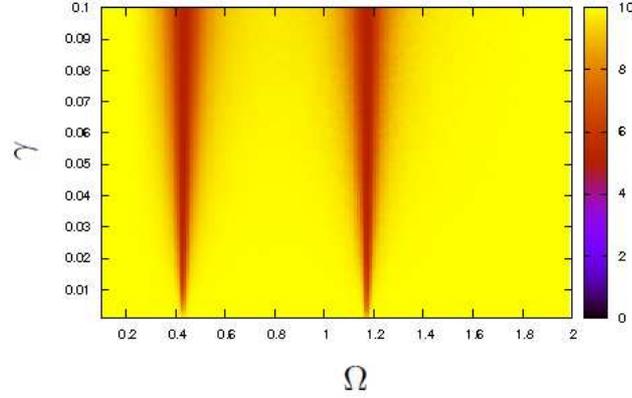


Figura 5.10: Espaço dos parâmetros γ e Ω . A escala de cores representa a energia do sistema central, que corresponde a um mapa harmônico. Para o banho, temos $N = 2$ mapas harmônicos com parâmetros de frequência geradas em uma distribuição do tipo Debye, fornecendo $k_1 = 1,169495$ e $k_2 = 0,427077$.

É evidente da figura 5.10 que quando a frequência Ω é próxima de 0,42 ou 1,2 então a energia efetiva do sistema é dissipada em sua maior parte, comparada às outras regiões do mesmo espaço de parâmetros. De modo a compreendermos o papel do número de osciladores na criação destes canais para a dissipação, apresentamos na figura 5.11 o espaço de parâmetros γ , Ω e E_S para $N = 10$ mapas no banho, onde agora a distribuição Debye fornece as frequências adicionais para o banho: $k_3 = 1,525609$, $k_4 = 1,511168$, $k_5 = 1,153066$, $k_6 = 0,536982$, $k_7 = 0,676852$, $k_8 = 1,526495$, $k_9 = 1,146632$ e $k_{10} = 0,982302$ (cf. seção 5.1).

É possível afirmar, das figuras 5.10 e 5.11, que quanto mais osciladores, mais canais são criados para a dissipação, o que é corroborado por nosso resultado analítico para a dissipação, dado por:

$$\lambda = 1 - \sum_{i=1}^N \left(\frac{\gamma_i}{k_i} \right)^2. \quad (5.17)$$

Com efeito, os graus de liberdade a mais criam canais adicionais para a dissipação da energia efetiva do sistema central. Isto permite inferir que é um comportamento global do problema como um todo, de maneira que quanto mais mapas no banho, maior será o número de canais para a dissipação da energia efetiva.

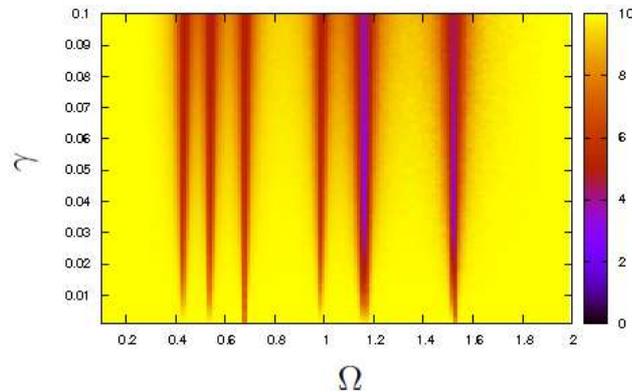


Figura 5.11: Espaço dos parâmetros γ e Ω . A escala de cores representa a energia do sistema central, que corresponde a um mapa harmônico. Agora o banho consiste de $N = 10$ mapas harmônicos com frequências: $k_1 = 1,169495$ e $k_2 = 0,427077$, $k_3 = 1,525609$, $k_4 = 1,511168$, $k_5 = 1,153066$, $k_6 = 0,536982$, $k_7 = 0,676852$, $k_8 = 1,526495$, $k_9 = 1,146632$ e $k_{10} = 0,982302$.

5.5 O potencial do tipo catraca

Na seção 5.4 estudamos um sistema bastante específico, um oscilador com “kick”, imerso em um banho de osciladores com “kick”. Isto é representado pela escolha do potencial ao qual a partícula do sistema está sujeita, dado pela equação (5.12). Toda a dinâmica é descrita em termos do mapa generalizado, que apresentamos no capítulo 4.

Ainda com o objetivo de estudarmos os efeitos de um banho térmico como o proposto nesta tese, um exemplo mais complexo que pode ser numericamente analisado é o potencial do tipo “ratchet”, ou catraca. Nesta seção, temos o objetivo de apresentar alguns resultados numéricos quando consideramos um potencial distinto da expressão (5.12). Ressaltamos que a dinâmica de uma partícula sujeita a um potencial qualquer em um ambiente com “kicks” é dada pelo nosso mapa generalizado. Deste modo, desejamos agora escolher um potencial para o sistema que possa apresentar um comportamento caótico.

A representação matemática para um potencial do tipo catraca consiste em uma função que apresenta assimetria espacial e que pode ser empregada para modelar as chamadas “catracas brownianas” [50, 51], conforme apresentada na figura 5.12.

Com finalidade ilustrativa, podemos citar um dos inúmeros problemas de transporte de partículas, que tira vantagem da assimetria espacial de alguns mecanismos [52], como o das “catracas brownianas”. O aparato da figura 5.13 possui um perfil “ratchet” (catraca) e em seu interior contém um líquido com partículas de tamanhos distintos (pontos pretos

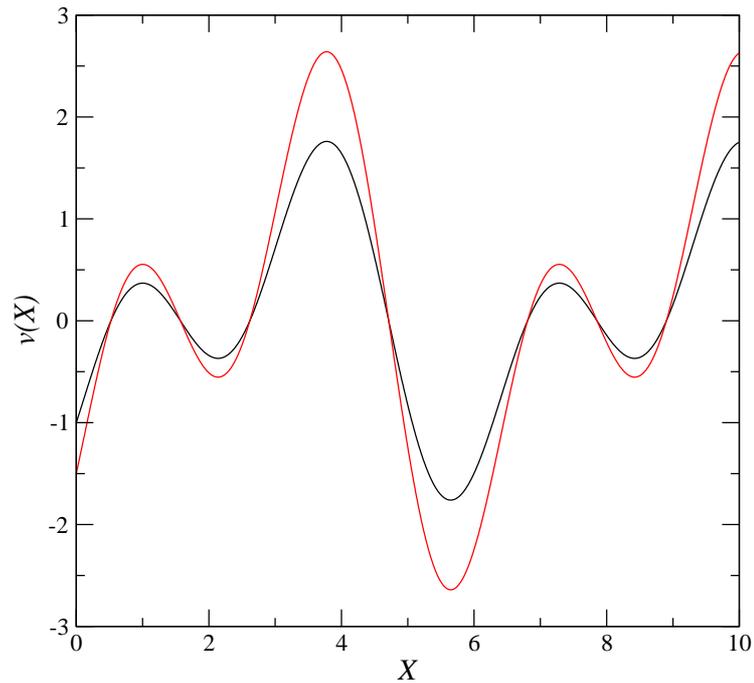


Figura 5.12: Uma função espacialmente assimétrica que pode representar um potencial catraca.

e brancos na figura). Através de um pistão, também indicado na figura 5.13, há uma diferença de pressão e, portanto, há corrente de partículas através do perfil do tipo catraca, permitindo a separação de partículas de tamanhos distintos.

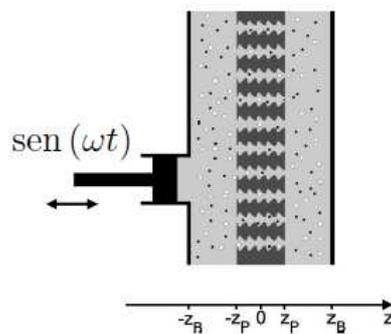


Figura 5.13: Figura esquemática do aparato experimental proposto na referência [52] para a separação de partículas. Esta figura foi adaptada da referência [52].

Em trabalhos recentes [53, 54], os autores apresentaram um modelo para o estudo dos fenômenos de transporte de partículas na ausência de força externa direcionada. De fato, os modelos do tipo “ratchet” são amplamente estudados atualmente [53] justamente por esta propriedade de transporte devido à assimetria do potencial combinada com a força externa cuja média é nula.

O mapa do tipo “ratchet” com ruído é dado por:

$$P_{n+1} = \lambda P_n + \alpha [\text{sen}(X_n) + a \text{sen}(2X_n + \varphi)] + \xi(n), \quad (5.18)$$

$$X_{n+1} = X_n + P_{n+1}, \quad (5.19)$$

onde λ é um parâmetro de dissipação, α é um parâmetro de amplitude e a o parâmetro associado à simetria do potencial. A variável $\xi(n)$ é uma variável estocástica que satisfaz às seguintes propriedades:

$$\langle \xi(n) \rangle = 0, \quad (5.20)$$

$$\langle \xi(n)^2 \rangle = 2 \frac{(1 - \lambda)}{\beta}. \quad (5.21)$$

Se considerarmos que $\xi(n) = 0$ para todo n , então teremos o mapa do tipo “ratchet” sem ruído.

Vários são os interesses neste tipo de sistema, dentre os quais se destaca a otimização do transporte para uma dada combinação dos parâmetros [53].

Uma forma prática de investigação da otimização, porém trabalhosa, consiste na construção do espaço de parâmetros, semelhante aos que apresentamos neste capítulo. A rigor, este tipo de construção é uma generalização [55] dos diagramas de bifurcação usual a um parâmetro, mostrado no capítulo 2, de modo que usualmente se faz um gráfico do tipo: $[\mu_1, \mu_2, \zeta]$, sendo μ_j ($j = 1, 2$) dois parâmetros do sistema e ζ alguma quantidade física. Neste caso, a grandeza de interesse é a corrente de “ratchet”, definida através de [53, 54]:

$$RC \equiv \frac{1}{n_c} \sum_{l=1}^{n_c} \left[\frac{1}{n - \vartheta} \sum_{i=\vartheta}^n p_i^{(l)} \right], \quad (5.22)$$

sendo n_c o número de condições iniciais e ϑ um valor de corte para o transiente temporal. O tamanho da órbita analisada é n .

No trabalho [54], os autores consideram o mapa do “ratchet” dado pelas relações (5.18) e (5.19) com o ruído $\xi(n)$ obedecendo às propriedades (5.20) e (5.21), onde foram estudadas os efeitos da temperatura sobre a corrente de “ratchet” no espaço de parâmetros. Na figura 5.14 o espaço de parâmetros é mostrado, onde a escala de cor representa a corrente de “ratchet”. Nesta figura, os autores consideraram $T = 10^{-2}$.

Podemos tomar os mapas (5.18) e (5.19) como o sistema em nosso modelo e estudarmos os efeitos do banho na corrente de “ratchet”. Deste modo, em lugar do ruído $\xi(n)$, teremos o banho constituído de N osciladores harmônicos com “kick”, cujas propriedades

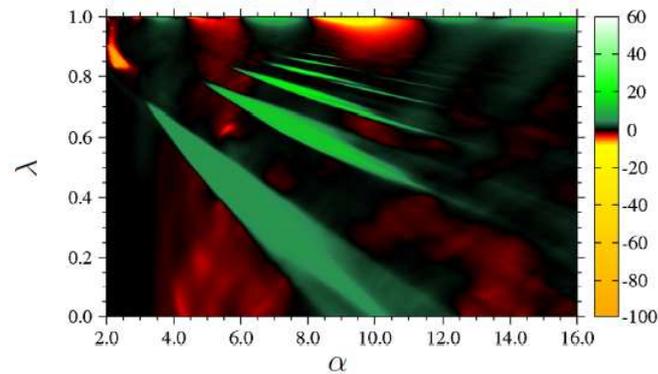


Figura 5.14: O espaço de parâmetros $[\alpha, \lambda, RC]$ do “ratchet”. Esta figura foi extraída de [54].

já conhecemos.

A figura 5.15 mostra a corrente de “ratchet” à partir dos dados em [53], para o mapeado por (5.18) e (5.19) sem ruído externo, isto é, para $\xi(n) = 0$.

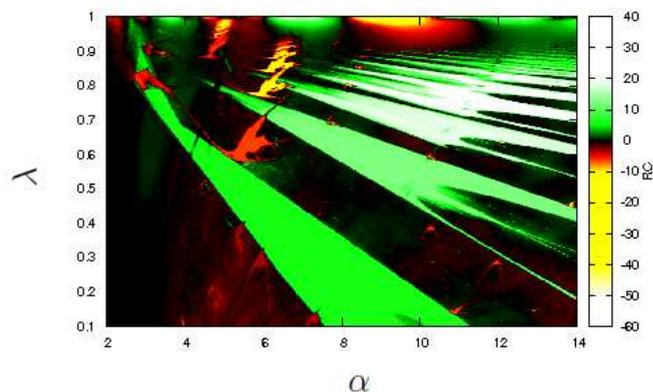


Figura 5.15: O espaço de parâmetros $[\alpha, \lambda, RC]$. A corrente de “ratchet” está mostrada na escala de cores. Esta figura foi reproduzida com os dados de [53].

Da figura 5.15 é possível identificar várias estruturas no espaço de parâmetros [53]. No limite conservativo, $\lambda = 1$, há uma variedade de estruturas que não apresentam bordas bem definidas, onde a corrente é tanto positiva quanto negativa.

Exceção feita ao limite conservativo, é possível identificarmos no espaço de parâmetros, estruturas grandes com bordas bem delimitadas em verde. Em vermelho, estruturas menores aparecem também com bordas bem definidas no espaço e fora do limite conservativo. Tais estruturas com bordas bem definidas são conhecidas na literatura e foram descritas primeiro por J. Gallas para o mapa de Hénon [55]. A exemplo do que ocorre no

diagrama de bifurcação a um parâmetro, estas estruturas também podem ser encontradas em um espaço de parâmetros onde a quantidade física não é a corrente, mas o período do atrator e também os expoentes de Lyapunov (cf. capítulo 2).

As estruturas isoperiódicas seguem um padrão no espaço de parâmetros: há uma linha preferencial para o aparecimento das diversas estruturas. Se os parâmetros forem tomados sobre tal reta preferencial, então é garantida a otimização da quantidade física, no caso a corrente.

Uma observação essencial é que na presença do ruído $\xi(n)$, algumas estruturas ainda sobrevivem. No entanto, conforme descrito em [54], tais estruturas não apresentam mais bordas tão bem definidas. Deste modo, é natural questionarmos os efeitos de um banho térmico sobre o sistema central constituído por um potencial do tipo “ratchet”. Simulações preliminares foram efetuadas para $N = 100$ e $\gamma = 0,001/\sqrt{N}$ e comparadas inicialmente com os resultados apresentados em [54].

A figura 5.16 mostra a corrente, em escala de cores similar a [53, 54], apresentando os efeitos deste banho.

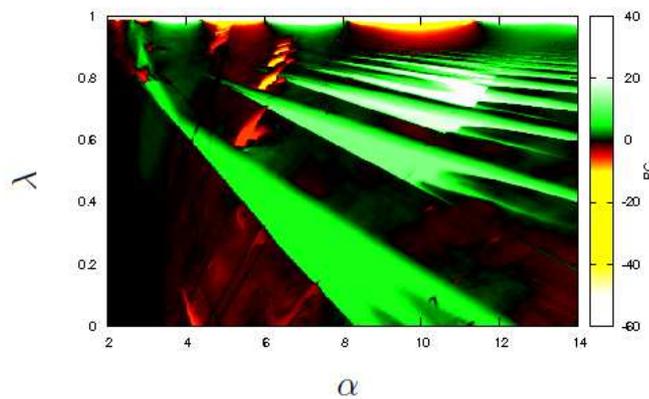


Figura 5.16: O espaço de parâmetros $[\alpha, \lambda, RC]$ do “ratchet” como sistema central imerso em banho térmico de $N = 100$ osciladores. A corrente de “ratchet” está mostrada na escala de cores. Esta figura foi reproduzida com os dados de [53], porém ao invés de utilizarmos o ruído externo, tomamos o “ratchet” como sistema central imerso em banho de $N = 100$ mapas harmônicos.

É evidente da figura 5.16 que as estruturas isoperiódicas não apresentam mais as bordas bem delimitadas. De fato, com o aumento da intensidade do ruído ou com o aumento de osciladores no banho, as estruturas isoperiódicas são destruídas. Este exemplo mostra claramente os efeitos de um conjunto de mapas harmônicos representando um banho térmico. Em conjunto com os exemplos mais simples apresentados neste capítulo,

este exemplo mostra a validade geral do mapa generalizado.

Conclusões

O modelo do sistema imerso em banho térmico é eficiente para descrever as interações microscópicas que produzem efeitos macroscópicos, como o movimento browniano. De fato, à partir de tal modelo é possível obter toda uma descrição clássica da resposta ao sistema, devido ao banho, e descrever o movimento do sistema de uma forma bastante geral através da equação generalizada de Langevin.

É neste contexto que neste trabalho propusemos um mapa tendo como ponto de partida o modelo de Caldeira-Leggett. Mostramos que o mapa proposto pode ser escrito e interpretado como um mapa generalizado contendo termos de força flutuante discreta e memória. Mostramos também como as quantidades estatísticas se alteram com os impulsos periódicos. Ademais, também verificamos que o mapa proposto para o ambiente representa um reservatório térmico, ao qual se pode atribuir uma temperatura e de onde obtivemos a distribuição de equilíbrio e relações importantes como a relação de flutuação-dissipação [44] em uma forma que não havia sido relatada na literatura conhecida. Esta relação consiste exatamente da conexão entre o processo microscópico da dissipação e da flutuação e assegura que o sistema como um todo alcança o equilíbrio para tempos longos.

Considerar o ambiente com impulsos periódicos traz como consequência uma dinâmica bastante rica com efeitos inesperados no sistema que está imerso no ambiente. Podemos citar como propriedades gerais: a dissipação, que é proveniente do acoplamento; a dinâmica não-usual dos osciladores que compõe o banho; a termalização, que é observada pela atribuição de uma temperatura ao banho; a relação de flutuação-dissipação em forma não-usual e a dinâmica intrinsecamente não-markoviana gerada pelos “kicks”.

Tais características são independentes do sistema considerado. São gerais e provenientes do ambiente e acoplamento com “kick” considerado.

Verificamos que as trocas de energia entre sistema e ambiente discretizados podem ocorrer e nas escalas de tempo observadas, há a dissipação do que chamamos de energia efetiva de um único mapa harmônico para o ambiente composto de um número finito de mapas harmônicos, um resultado que foi verificado analiticamente para uma partícula sujeita a um potencial qualquer como sistema.

Com efeito, assim como a equação generalizada de Langevin é extremamente geral, no sentido de que descreve uma variedade de sistemas físicos, propomos aqui o mesmo de nosso mapa generalizado. Um exemplo da generalidade do mapa é dado ao investigarmos o ambiente, representado pelos mapas harmônicos. No espaço de fases, cada mapa harmônico fornece órbitas elípticas rotacionadas em relação ao par de eixos canônicos, que escritos nas coordenadas rotacionadas, sugerem o acoplamento não somente na posição, mas também no momentum de cada mapa do banho.

Para exemplificar a aplicabilidade do mapa, estudamos o movimento browniano, tanto para o caso em que os efeitos de memória são nulos, quanto para os efeitos de memórias a curto prazo. Expressões analíticas para o caso markoviano também foram obtidas para a difusão espacial e do momentum e se confirmaram numericamente.

Outro exemplo estudado aqui através do ambiente discretizado é o dos efeitos globais, observados através da construção dos espaços de parâmetros, do banho térmico sobre um sistema cujo potencial é do tipo catraca, que pode apresentar caos. Verifica-se nas simulações numéricas preliminares que o banho térmico realmente influencia de forma muito semelhante a um ruído branco, embora existam os efeitos da memória, que ainda não foram estudados na totalidade.

Como trabalhos futuros, propomos potenciais distintos para o sistema central e para o banho térmico em investigações numéricas. Também podem ser estudados os efeitos das distribuições de frequências para o banho térmico no caso harmônico, ou no caso em que uma frequência característica possa ser atribuída a cada oscilador.

Outro estudo consiste em investigar as distribuições para os tempos de “kick”, considerando tempos distintos de “kick” para o sistema, o banho e o acoplamento. Uma outra possibilidade é o estudo dos efeitos da sincronização em mapas acoplados, uma vez que várias formas de investigar o fenômeno da sincronização são propostas na literatura [56]. Uma compreensão mais detalhada também das distribuições do parâmetro de acoplamento é necessária.

Uma análise mais rigorosa em termos da teoria de sistemas dinâmicos pode ser feita, considerando grandezas fundamentais da teoria, como os expoentes de Lyapunov, a mu-

dança nas órbitas periódicas através da inserção de mais graus de liberdade, o que é conseguido pelo acréscimo do número de mapas harmônicos no ambiente bem como a aproximação da medida invariante com a distribuição de equilíbrio.

Como possível estudo, também podemos citar a busca por formas da densidade espectral que eventualmente possam tornar markoviana a dinâmica do mapa proposto.

O limite $\tau \rightarrow 0$

A.1 O mapa original

Neste apêndice vamos demonstrar que no limite $\tau \rightarrow 0$ em tempos apropriados, vale a relação de flutuação-dissipação obtida no capítulo 3 para a equação generalizada de Langevin.

Vamos iniciar com o mapa original, pois fazer $k_i \rightarrow 0$ no mapa adimensional só terá sentido se fizermos $\tau \rightarrow 0$ mantendo ω_i fixo, o que nos leva à própria análise do mapa original.

Comentamos no capítulo 4 que em uma diferença de tempos apropriados, as equações de movimento para o tempo contínuo devem ser recuperadas.

Com efeito, as quantidades físicas associadas à trajetória contínua, em lugar da órbita discreta dada pelos mapas, podem ser obtidas se fizermos:

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\vec{r}_{n+1} - \vec{r}_n}{\tau}, \quad (\text{A.1})$$

para qualquer variável de estado \vec{r} no tempo n .

Já verificamos que a constante de movimento é expressa, em dimensões de energia, pela equação (4.10). O mapa harmônico do banho (cf. seção 4.2) em unidades de posição e momentum é dado por:

$$p_{n+1} = p_n - m\omega^2\tau x_n, \quad (\text{A.2})$$

$$x_{n+1} = x_n + \frac{\tau}{m}p_{n+1}. \quad (\text{A.3})$$

De acordo com a expressão (A.1), teremos:

$$\frac{dp(t)}{dt} = -m\omega^2 x(t), \quad (\text{A.4})$$

$$\frac{dx(t)}{dt} = \frac{p(t)}{m}, \quad (\text{A.5})$$

exatamente conforme o esperado para um oscilador harmônico sem “kick”. A constante de movimento (4.10) no limite $\tau \rightarrow 0$ fica:

$$h(x, p, \tau \rightarrow 0) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (\text{A.6})$$

A função partição canônica

$$Z = \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^N \prod_{i=1}^N \frac{1}{\omega_i \sqrt{1 - \omega_i^2 \tau^2 / 4}}, \quad (\text{A.7})$$

claramente se torna

$$Z(\tau \rightarrow 0) = \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^N \prod_{i=1}^N \frac{1}{\omega_i}, \quad (\text{A.8})$$

no limite $\tau \rightarrow 0$.

A força flutuante é descrita por:

$$F_n \equiv \sum_{i=1}^N \left[\Gamma_i g_{n-1}^{(i)} x_0^{(i)} + \frac{\Gamma_i \tau}{m_i} f_{n-1}^{(i)} p_0^{(i)} \right]. \quad (\text{A.9})$$

Com o auxílio destes resultados e da função partição canônica, a função de autocorrelação é expressa por:

$$\langle F_n F_{n'} \rangle = k_B T \sum_{i=1}^N \frac{\Gamma_i^2}{m_i \omega_i^2 (1 - \omega_i^2 \tau^2 / 4)} \cos [(n - n') \theta_i]. \quad (\text{A.10})$$

O núcleo de memória é tal que:

$$K_{n,n'} = \sum_{i=1}^N \frac{\Gamma_i^2}{m_i \omega_i^2} g_{n-n'-1}^{(i)}, \quad (\text{A.11})$$

onde

$$g_{n-n'-1}^{(i)} = \cos [(n - n') \theta_i] - \frac{\omega_i \tau}{2\sqrt{1 - \omega_i^2 \tau^2 / 4}} \text{sen} [(n - n') \theta_i]. \quad (\text{A.12})$$

Consequentemente,

$$g_{n-n'-1}^{(i)}(\tau \rightarrow 0) = \cos [(n - n')\theta_i], \quad (\text{A.13})$$

o que conduz à:

$$K_{n,n'}(\tau \rightarrow 0) = \sum_{i=1}^N \frac{\Gamma_i^2}{m_i \omega_i^2} \cos [(n - n')\theta_i], \quad (\text{A.14})$$

e também para a função de autocorrelação

$$\langle F_n F_{n'} \rangle = k_B T \sum_{i=1}^N \frac{\Gamma_i^2}{m_i \omega_i^2} \cos [(n - n')\theta_i]. \quad (\text{A.15})$$

Logo, podemos exprimir a diferença:

$$\langle F_n F_{n'} \rangle - k_B T K_{n,n'}(\tau \rightarrow 0) = 0, \quad (\text{A.16})$$

conduzindo à forma

$$\langle F_n F_{n'} \rangle = k_B T K_{n,n'}(\tau \rightarrow 0), \quad (\text{A.17})$$

como queríamos demonstrar.

O termo de soma: memória e dissipação

Consideremos o termo de soma total, que chamaremos de S :

$$S \equiv \sum_{n'=0}^{n-1} X_{n'} f_{n-n'-1}^{(i)}. \quad (\text{B.1})$$

Desejamos demonstrar que:

$$S = \frac{1}{k_i^2} \left[g_{-1}^{(i)} X_n - g_{n-1}^{(i)} X_0 - \sum_{n'=1}^n g_{n-n'-1}^{(i)} P_{n'} \right]. \quad (\text{B.2})$$

Para esta demonstração, vamos empregar a relação:

$$f_{n-n'-1}^{(i)} = \frac{g_{n-n'-2}^{(i)} - g_{n-n'-1}^{(i)}}{k_i^2}, \quad (\text{B.3})$$

proveniente do mapa

$$g_{n+1}^{(i)} = g_n^{(i)} - k_i^2 f_{n+1}^{(i)}. \quad (\text{B.4})$$

A relação acima aplicada na soma S fornece:

$$S = \frac{1}{k_i^2} \left[\sum_{n'=0}^{n-1} g_{n-n'-2}^{(i)} X_{n'} - \sum_{n'=0}^{n-1} g_{n-n'-1}^{(i)} X_{n'} \right] \quad (\text{B.5})$$

$$= \frac{S_1 + S_2}{k_i^2}. \quad (\text{B.6})$$

Vamos analisar somente o termo de soma S_1 inicialmente. Com uma mudança conve-

niente nos índices, podemos também alterar os limites inferior e superior da soma:

$$S_1 = \sum_{n'=0}^{n-1} g_{n-n'-2}^{(i)} X_{n'} \quad (\text{B.7})$$

$$= \sum_{n'=1}^n g_{n-n'-1}^{(i)} X_{n'-1} \quad (\text{B.8})$$

O segundo termo chamado S_2 também pode ser escrito de maneira conveniente, *i. e.*, de modo a apresentar os mesmos limites de S_1 para o somatório:

$$S_2 = \sum_{n'=0}^{n-1} g_{n-n'-1}^{(i)} X_{n'}, \quad (\text{B.9})$$

$$= \sum_{n'=1}^{n-1} g_{n-n'-1}^{(i)} X_{n'} + g_{n-1}^{(i)} X_0 + g_{-1}^{(i)} X_n - g_{-1}^{(i)} X_n, \quad (\text{B.10})$$

$$= \sum_{n'=1}^n g_{n-n'-1}^{(i)} X_{n'} + g_{n-1}^{(i)} X_0 - g_{-1}^{(i)} X_n. \quad (\text{B.11})$$

O termo de soma S fica então:

$$S = \frac{1}{k_i^2} \left[\sum_{n'=1}^n g_{n-n'-1}^{(i)} X_{n'-1} - \sum_{n'=1}^n g_{n-n'-1}^{(i)} X_{n'} - g_{n-1}^{(i)} X_0 + g_{-1}^{(i)} X_n \right] \quad (\text{B.12})$$

$$= \frac{1}{k_i^2} \left[\sum_{n'=1}^n (X_{n'-1} - X_{n'}) g_{n-n'-1}^{(i)} - g_{n-1}^{(i)} X_0 + g_{-1}^{(i)} X_n \right] \quad (\text{B.13})$$

Notemos que na última relação, o termo de soma pode ser reescrito em termos do momentum, se lembrarmos que:

$$X_{n+1} = X_n + P_{n+1}, \quad (\text{B.14})$$

$$-(X_{n-1} - X_n) = P_n. \quad (\text{B.15})$$

Consequentemente:

$$S = \frac{1}{k_i^2} \left[g_{-1}^{(i)} X_n - g_{n-1}^{(i)} X_0 - \sum_{n'=1}^n g_{n-n'-1}^{(i)} P_{n'} \right], \quad (\text{B.16})$$

como queríamos demonstrar.

Referências Bibliográficas

- [1] E. Ott. *Chaos in Dynamical Systems* (Cambridge, New York, 2002), 2 edição.
- [2] K. Alligood, J. Yorke e T. Sauer. *Chaos: An Introduction to Dynamical Systems* (Springer, New York, 1996).
- [3] D. Gullick. *Encounters with Chaos* (McGraw-Hill, USA, 1992).
- [4] L. H. A. Monteiro. *Sistemas Dinâmicos* (Livraria da Física, São Paulo, 2006), 2 edição.
- [5] S. H. Strogatz. *Nonlinear Dynamics and Chaos: With Applications to Physics, Biology, Chemistry and Engineering* (Perseus Books, USA, 2001).
- [6] E. Cortes, B. J. West e K. Lindenberg. On the generalized Langevin equation: classical and quantum mechanical. *J. Chem. Phys.* **82**, 2708 (1985).
- [7] R. Zwanzig. Memory Effects in Irreversible Thermodynamics. *Phys. Rev.* **124**, 983–992 (1961).
- [8] H. Mori. Transport, Collective Motion, and Brownian Motion. *Progress of Theoretical Physics* **33**, 3, 423–455 (1965).
- [9] P. Ullersma. An Exactly Solvable Model for Brownian Motion. *Physica A* **32**, 27–55 (1966).
- [10] U. Weiss. *Quantum Dissipative Systems* (World Scientific, USA, 2008), 3 edição.
- [11] A. Damjanovic, I. Kosztin, U. Kleinekathöfer e K. Schulten. Excitons in a photosynthetic light-harvesting system: A combined molecular dynamics, quantum chemistry, and polaron model study. *Phys. Rev. E* **65** (2002).

-
- [12] J. C. Cressoni, M. A. A. da Silva e G. M. Viswanathan. Amnestically Induced Persistence in Random Walks. *Phys. Rev. Lett.* **98**, 070603 (2007).
- [13] S. Fedotov. Non-Markovian random walks and nonlinear reactions: Subdiffusion and propagating fronts. *Phys. Rev. E* **81** (2010).
- [14] P. Langevin. Sur la théorie du mouvement brownien. *Comp. Rend. Acad. Sci. (Paris)* **146**, 530–533 (1908).
- [15] R. Kubo. The fluctuation-dissipation theorem. *Rep. Prog. Phys.* **29**, 255–284 (1966).
- [16] B. U. Felderhof. On the derivation of the fluctuation-dissipation theorem. *J. Phys. A: Math. Gen.* **11** (1978).
- [17] J. Rosa e M. W. Beims. Dissipation and transport dynamics in a ratchet coupled to a discrete bath. *Phys. Rev. E* **78**, 031126 (2008).
- [18] C. Manchein, J. Rosa e M. W. Beims. Chaotic motion at the emergence of the time averaged energy decay. *Physica D* **238**, 145 (2009).
- [19] M. A. Marchiori e M. A. M. de Aguiar. Energy dissipation via coupling with a finite chaotic environment. *Phys. Rev. E* **83**, 061112 (2011).
- [20] H. Hasegawa. Classical small systems coupled to finite baths. *Phys. Rev. E* **83**, 021104 (2011).
- [21] M. Kac. Random Walk and the Theory of Brownian Motion. *The American Mathematical Monthly* **54**, 369–391 (1947).
- [22] A. O. Caldeira e A. J. Leggett. Influence of Dissipation on Quantum Tunneling in Macroscopic Systems. *Phys. Rev. Lett.* **46**, 211–214 (1981).
- [23] S. Wimberger, M. Sadgrove, S. Parkins e R. Leonhardt. Experimental verification of a one-parameter scaling law for the quantum and "classical" resonances of the atom-optics kicked rotor. *Phys. Rev. A* **71** (2005).
- [24] G. J. Duffy, S. Parkins, T. Müller, M. Sadgrove, R. Leonhardt e A. C. Wilson. Experimental investigation of early-time diffusion in the quantum kicked rotor using a Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. E.* **70** (2004).
- [25] R. Graham, M. Schlautmann e P. Zoller. Dynamical localization of atomic-beam deflection by a modulated standing light wave. *Phys. Rev. A.* **45** (1992).

- [26] F. L. Moore, J. C. Robinson, C. Bharucha, P. E. Williams e M. G. Raizen. Observation of Dynamical Localization in Atomic Momentum Transfer: A New Testing Ground for Quantum Chaos. *Phys. Rev. Lett.* **73** (1994).
- [27] H. Kubotani, T. Okamura e M. Sakagami. Quantum decoherence due to non-linear dynamics of environment. *Physica A* **214** (1995).
- [28] D. Rossini, G. Benenti e G. Casati. Conservative chaotic map as a model of quantum many-body environment. *Phys. Rev. E* **74** (2006).
- [29] A. J. Lichtenberg e M. A. Lieberman. *Regular and Chaotic Dynamics* (Springer, New York, 1992).
- [30] S. Akiyama. A Derivation of a Langevin Type-Map from a Many-Degrees-of-Freedom Symplectic Map and Its Invariant Measure. *Prog. Theor. Phys.* **87**, 235–240 (1992).
- [31] E. Rabani e B. J. Berne. Energy Dissipation in Nonlinear Systems Coupled to a Bath: On the Use of Perturbative Maps. *J. Phys. Chem. A* **102**, 9380–9389 (1998).
- [32] H. Goldstein, L. Poole e J. L. Safko. *Classical Mechanics* (Addison Wesley, USA, 2002), 3 edição.
- [33] J. W. Leech e O. C. C. de. *Mecânica Analítica* (Ao livro técnico S. A. e Editora da Universidade de São Paulo, Rio de Janeiro, 1971).
- [34] B. V. Chirikov. A Universal Instability of Many-Dimensional Oscillator Systems. *Phys. Rep.* **52**, 263 (1979).
- [35] C. F. Woellner, S. R. Lopes, R. L. Viana e I. L. Caldas. Clustering and diffusion in a symplectic map lattice with non-local coupling. *Chaos, Solitons, Fractals* **41**, 5, 2201 – 2215 (2009).
- [36] R. L. Devaney. *An Introduction to Chaotic Dynamical Systems* (Addison-Wesley, USA, 1989), 2 edição.
- [37] S. Wiggins. *Introduction to Applied Nonlinear Dynamical Systems and Chaos* (Cambridge, New York, 2002), 2 edição.
- [38] R. Brown. A brief account of microscopical observations made in the months of June, July and August, 1827, on the particles contained in the pollen of plants; and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies. *Philosophical Magazine* **6** (1829).

- [39] H. M. Nussenzveig. *Curso de Física Básica*, volume 2 (Edgard Blucher, São Paulo, 2003), 2 edição.
- [40] A. Einstein. Über die von molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten Suspendierten Teilchen. *Annalen der Physik* **17**, 549–560 (1950).
- [41] J. M. Silva e J. A. S. Lima. Quatro abordagens para o movimento browniano. *Revista Brasileira do Ensino de Física* **29**, 25 (2007).
- [42] C. Beck. Dynamical systems of Langevin type. *Physica A* **233**, 419–440 (1996).
- [43] R. M. Szmoski. Análise da dinâmica de partículas interagentes a partir de redes de mapas acoplados (2009).
- [44] S. A. Abdulack, W. Strunz e M. W. Beims. Finite kicked environments and the fluctuation-dissipation relation. *Phys. Rev. E* **89** (2014).
- [45] R. W. Robinett. Quantum and classical probability distributions for position and momentum. *Am. J. Phys.* **63** (1995).
- [46] I. V. L. Costa, R. Morgado, M. V. B. T. Lima e F. A. Oliveira. The Fluctuation-Dissipation Theorem fails for fast superdiffusion. *Europhys. Lett.* **63** (2003).
- [47] J. B. Marion e S. T. Thornton. *Classical Dynamics of Particles and Systems* (Brooks, 2004).
- [48] T. Tomé e M. J. de Oliveira. *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade* (EDUSP, São Paulo, 2001).
- [49] H. Press. *Numerical Recipes in C. The Art of Scientific Computing* (Cambridge University Press, London, 1992), 2 edição.
- [50] J. Rosa. *Transferência de Energia em Meios Modulados e Transporte de Partículas em Catracas*. Tese de Doutorado, Universidade Federal do Paraná, Curitiba (2008).
- [51] M. O. Magnasco. Forced Thermal Ratchets. *Phys. Rev. Lett.* **71** (1993).
- [52] C. Kettner, P. Reimann, P. Hänggi e F. Müller. Drift ratchet. *Phys. Rev. E* **61**, 312 (2000).
- [53] A. Celestino, C. Manchein, H. A. Albuquerque e M. W. Beims. Ratchet Transport and Periodic Structures in Parameter Space. *Phys. Rev. Lett.* **106**, 234101 (2011).

-
- [54] C. Manchein, A. Celestino e M. W. Beims. Temperature Resistant Optimal Ratchet Transport. *Phys. Rev. Lett.* **110**, 114102 (2013).
- [55] J. A. C. Gallas. Structure of the parameter space of the Hénon map. *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2714–2717 (1993).
- [56] Y. Kuramoto. *Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence* (Springer-Verlag, Berlin, 1984).