

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

JOÃO CARLOS XAVIER

BANHOS CAÓTICOS FINITOS: RELAÇÃO ENTRE
DISSIPACÃO E EXPOENTES DE LYAPUNOV

Curitiba
2015

Universidade Federal do Paraná
Programa de Pós-Graduação em
Física
Tese de Doutorado

João Carlos Xavier

**BANHOS CAÓTICOS FINITOS: RELAÇÃO
ENTRE DISSIPACÃO E EXPOENTES DE
LYAPUNOV**

Tese apresentada ao Programa de Pós - Graduação em Física do Setor de Ciências Exatas da Universidade Federal do Paraná como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Doutor em Física.

Orientador: *Prof. Dr. Marcus W. Beims*

Curitiba - PR

2015

X3b

Xavier, João Carlos

Banhos caóticos finitos: relação entre dissipação e expoentes de Lyapunov / João Carlos Xavier. – Curitiba, 2015.
116f. : il. [algumas color.] ; 30 cm.

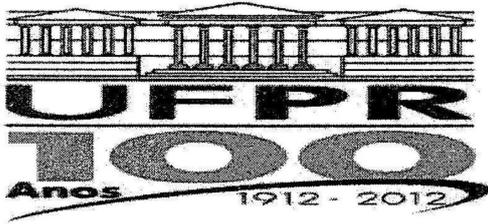
Tese (doutorado) - Universidade Federal do Paraná, Setor de Ciências Exatas, Programa de Pós-graduação em Física, 2015.

Orientador: Marcus Werner Beims.

Bibliografia: p. 112-116.

1. Física. 2. Lyapunov, Função de. 3. Teoria dos sistemas dinâmicos. I. Universidade Federal do Paraná. II. Beims, Marcus Werner. III. Título.

CDD: 531.11



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 JOÃO CARLOS XAVIER, consideram aprovada a redação final da tese, cujo título é: *“Banhos Caóticos Finitos: Relação entre Dissipação e Expoentes de Lyapunov”*.

Curitiba, 13 de março de 2015.

Banca Examinadora

Prof. Dr. Marcus Werner Beims
(UFPR)

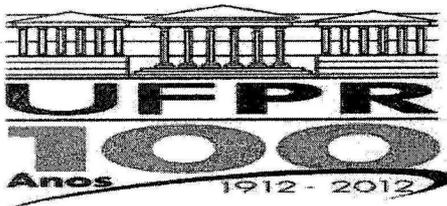
Prof. Dr. Marcos Gomes Eleutério da Luz
(UFPR)

Prof. Dr. Renato Moreira Angelo
(UFPR)

Prof. Dr. Marcus A. Martinez de Aguiar
(UNICAMP)

Prof. Dr. Mário José de Oliveira
(IF-USP)

Assinatura



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

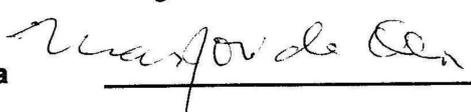
DEFESA DE TESE DE DOUTORADO

Banhos Caóticos Finitos: Relação entre Dissipação e Expoentes de Lyapunov.

ALUNO

JOÃO CARLOS XAVIER

Em sessão pública iniciada às oito horas do dia 13 de março de 2015, após um seminário sob o título acima e posterior arguição, esta banca examinadora decidiu Aprovar ao candidato com o conceito global A.

Banca Examinadora	Assinatura	Conceito
Prof. Dr. Marcus Werner Beims (UFPR)		<u>A</u>
Prof. Dr. Marcos Gomes Eleutério da Luz (UFPR)		<u>A</u>
Prof. Dr. Renato Moreira Angelo (UFPR)		<u>A</u>
Prof. Dr. Marcus A. Martinez de Aguiar (UNICAMP)		<u>A</u>
Prof. Dr. Mário José de Oliveira (IF-USP)		<u>A</u>

Dedico esta tese a meu avô Ocinino Pedro.

Agradecimentos

- A minha Família, pelo apoio e suporte.
- A minha namorada Luciana Mazon, pela compreensão.
- Ao Prof. Marcus W. Beims, pela orientação e por me proporcionar a oportunidade do intercâmbio em Dresden na Alemanha.
- Ao Prof. Walter Strunz da TU - Dresden, pela orientação durante os nove meses de intercâmbio.
- A Capes, pela bolsa de estudos no Brasil e na Alemanha.
- Ao Departamento de Física da UFPR, por me proporcionar a oportunidade de realizar as atividades necessárias ao desenvolvimento deste trabalho.
- Ao Programa de Pós-Graduação em Física, por acreditar em meu trabalho.
- Aos colegas de Pós-Graduação, pela companhia durante estes quatro anos.

Resumo

Consideramos o fluxo de energia entre um oscilador harmônico clássico unidimensional e um conjunto de N osciladores quárticos bidimensionais e caóticos, os quais representam um banho finito. Usando a Teoria da Resposta Linear, obtemos uma expressão analítica para a equação de movimento do oscilador harmônico, a qual contém um termo de atrito dependente da frequência do sistema e das propriedades do banho. O coeficiente de dissipação é comparado com resultados numéricos, mostrando sua validade para casos do banho com dinâmica caótica e mista (coexistência de movimento caótico e regular). Por fim, a dissipação é expressa em termos do Expoente de Lyapunov médio do banho, mostrando assim que as ressonâncias entre as frequências do sistema e banho são mais eficientes na promoção de dissipação do que o valor do Expoente de Lyapunov médio e o número de elementos do ambiente caótico.

Palavras-Chave: Banhos Caóticos; Dissipação; Fluxo de Energia; Expoentes de Lyapunov.

Abstract

We consider the energy flow between a classical one-dimensional harmonic oscillator and a set of N two-dimensional chaotic oscillators, which represent the finite environment. Using linear response theory we obtain an analytical effective equation for the harmonic oscillator, which includes a frequency dependent dissipation and memory effects. The dissipation coefficient is compared to numerical results and we show its validity for environments with mixed (regular and chaotic) and chaotic motion. We also expressed the dissipation in terms of the environment mean Lyapunov exponent. In addition, resonances between system and environment frequencies are shown to be more efficient to generate dissipation than larger mean Lyapunov exponents, or a larger number of bath chaotic oscillators.

Keywords: Chaotic Bath; Dissipation; Energy flow; Lyapunov exponents.

Sumário

Agradecimentos	6
Resumo	7
Abstract	8
Sumário	9
1 Introdução	1
2 Revisão Teórica	1
2.1 Sistemas Dinâmicos	1
2.2 Sistemas Dinâmicos Conservativos	3
2.3 Sistemas Integráveis	8
2.4 O Teorema KAM	11
2.4.1 Toros Racionais	12
2.4.2 Torus Irracionais	14
2.5 Transição para Estocasticidade Global	15
2.5.1 Ergodicidade	16
2.5.2 Mistura ou “Mixing” e Decaimento da Correlação	17
2.6 Expoentes de Lyapunov	18

3	Equação de Langevin	23
3.1	O Movimento Browniano	23
3.2	Equação Generalizada de Langevin	27
4	Banhos Caóticos	34
4.1	A Teoria da Resposta Linear (TRL)	39
5	Resultados	43
5.1	O Modelo	44
5.2	O Oscilador Quártico (OQ)	45
5.3	Efeitos do Banho Caótico	51
5.4	A Equação do Movimento para o Sistema	61
5.5	O Termo de Dissipação	66
5.5.1	A solução Numérica para γ	75
5.5.2	A solução “Analítica” para γ	79
5.5.3	Dissipação e o Expoente de Lyapunov do Banho	83
6	Conclusões	88
A	Equação Generalizada de Langevin	90
B	Teoria da Resposta Linear	104
C	Cálculo da Função Resposta	106
	Referências Bibliográficas	113

Introdução

Quando considera-se os efeitos da vizinhança sobre um sistema de interesse, obtém-se um problema físico de difícil solução. Devido ao ambiente externo ser constituído de um grande número de elementos, equações fenomenológicas como a Equação de Langevin e métodos estatísticos passam a ser utilizados, relacionando efeitos microscópicos a propriedades macroscópicas do sistema.

Um dos modelos pioneiros na descrição de sistemas acoplados a um grande número de elementos, veio com o movimento Browniano, observado pelo biólogo Robert Brown [1] e estudado por Einstein [2]. Neste modelo, utilizado para descrever as trajetórias de pequenas partículas de pólen (sistema) sobre a água (ambiente), considera-se que o comportamento do sistema é descrito pela equação de Langevin, de forma que todos os efeitos do ambiente estão contidos em uma força dependente do tempo e em uma força de atrito dependente da velocidade da partícula. Assim, é possível observar as trocas de energia entre o sistema e o ambiente, sem considerar o comportamento individual de cada constituinte da vizinhança. Em seu trabalho, Einstein também apresentou o primeiro exemplo do Teorema Flutuação-Dissipação [3], mostrando que a difusão da partícula do sistema é uma consequência das flutuações na sua velocidade, enquanto a sua mobilidade está associada ao processo de dissipação e a resposta do sistema às perturbações geradas pelo reservatório. É importante salientar aqui, que quando nos referimos a reservatório, ambiente ou vizinhança, estamos falando do banho térmico, ou banho, com o qual o sistema de interesse interage e para onde flui sua energia. Assim, o banho térmico é o elemento responsável por fazer com que o sistema alcance o equilíbrio térmico, ou seja, um estado em que sua energia não mude drasticamente, mas apenas apresente pequenas flutuações em torno de seu valor de equilíbrio.

Recentemente, o movimento Browniano tem sido descrito como emergindo das in-

terações de uma partícula com uma vizinhança formada de um conjunto de osciladores harmônicos [4–6]. É a partir deste fato que o movimento Browniano pode passar a ser explorado em um contexto quântico [4], pois a descrição de uma Hamiltoniana para o banho permite que os métodos de quantização da mecânica quântica sejam aplicados [7], o que não era possível quando o problema era explorado diretamente pela Equação de Langevin. Neste contexto, surge o modelo Caldeira-Leggett [4], o qual é capaz de descrever dissipação em mecânica quântica quando o acoplamento entre sistema e banho é fraco. Para isto, o modelo considera o ambiente externo ao sistema de interesse como formado de um conjunto de osciladores harmônicos que, descritos através da mecânica quântica de sistemas conservativos, permitem interpretar a ação do ambiente como a responsável pela dissipação da energia do sistema.

Apesar de ter sido proposto em um contexto quântico, o modelo Caldeira-Leggett tem sido largamente explorado em um contexto clássico [8–13], permitindo a descrição, por exemplo, dos efeitos gerados por ambientes fora do equilíbrio [8] ou não estacionários [9], efeitos de acoplamento [10, 11], descrição das propriedades de sólidos [12] e efeitos gerados por ruídos que perturbam o banho [13].

Quando considerado um acoplamento bilinear entre as coordenadas do reservatório e do sistema, um Hamiltoniano modificado e o limite em que o número de osciladores tende ao infinito, o modelo Caldeira-Leggett faz com que a equação do movimento para o sistema recaia na equação de Langevin [7], sendo satisfeito também o Teorema Flutuação-Dissipação. Com isto, a tempos longos, sistema e ambiente termalizam, não existindo mais grandes trocas de energia entre eles, mas apenas pequenas flutuações nas suas energias em torno de um estado de equilíbrio. Assim, um ambiente externo, ou banho, constituído de infinitos osciladores harmônicos, leva a um fluxo irreversível de energia do sistema para o reservatório, de forma que a dissipação torna-se um resultado da interação entre ambos [14]. Como o modelo Caldeira-Leggett envolve uma Hamiltoniana independente do tempo para o problema sistema mais banho mais interação, trata-se de um problema conservativo, fazendo com que irreversibilidade neste contexto indique um tempo muito grande para a energia voltar do banho para o sistema, assim não sendo possível observá-lo.

Mas apesar do sucesso do modelo Caldeira-Leggett em descrever processos dissipativos, tanto em um contexto clássico quanto em um contexto quântico, em muitas situações realísticas o ambiente externo é pequeno e não justifica considerar um reservatório constituído de infinitos elementos. Isto ocorre por exemplo com uma molécula que atua como uma antena coletora de luz, que absorve apenas algumas frequências específicas que podem ser pensadas como geradas pela interação da molécula com algumas frequên-

cias específicas de um banho finito [15]. Com isto, é conveniente considerar o ambiente como sendo composto de um número N finito de osciladores harmônicos, por exemplo $1 \lesssim N \lesssim 400$. Sob esta circunstância, o modelo Caldeira-Leggett continua válido, porém, passa a ser explorado de um outro ponto de vista, o de sistemas dinâmicos. Através da Hamiltoniana do banho, é possível obter uma equação de movimento para cada um de seus constituintes, que juntamente com a equação de movimento para o sistema, constitui um sistema dinâmico para descrever sistema mais ambiente [16–19]. Deste ponto de vista, toda a informação a respeito da complexa dinâmica do sistema, advém das equações do movimento para o problema completo (sistema + ambiente + interação).

Nos últimos anos, a utilização de banhos finitos de osciladores harmônicos vem sendo considerada na descrição das propriedades de sistemas interagindo com sua vizinhança [20–29]. Tais propriedades envolvem a termalização do sistema [20, 21], efeitos sobre o seu calor específico [22, 23], fluxo irreversível de energia entre o sistema e o banho [24, 25], distribuição de energia para o sistema [26, 27] e efeitos do acoplamento [28, 29].

No contexto de banhos finitos, o modelo Caldeira-Leggett, porém com N finito, continua sendo um elemento fundamental, pois é ele quem permite a descrição dos efeitos microscópicos do ambiente através do sistema dinâmico relacionado ao problema completo. Mas, como o modelo considera o banho constituído de osciladores harmônicos, isto limita a dinâmica de seus constituintes ao movimento regular. No entanto, o regime dinâmico presente na vizinhança afeta o comportamento do sistema de interesse, de tal forma que quando seu movimento é caótico, os efeitos da dissipação tornam-se muito mais pronunciáveis [30, 31]. Para observar este fato com mais detalhes, troca-se a Hamiltoniana de uma soma de osciladores harmônicos por uma Hamiltoniana de baixa dimensão (bidimensional) e que apresente movimento caótico. Esta mudança permite explorar o comportamento do sistema novamente através do sistema dinâmico do problema completo, uma vez que a sua dimensão é pequena [32–34].

Este acoplamento de um sistema de interesse com um reservatório caótico de baixa dimensionalidade, leva o sistema a termalizar [35], como ocorre no caso de uma partícula em movimento Browniano interagindo com uma grande vizinhança. Desta forma, este fato permite pensar que sistemas caóticos podem desempenhar o papel de reservatórios térmicos, gerando fluxos irreversíveis de energia do sistema para o ambiente, porém sem considerar um número infinito de graus de liberdade. Estes fluxos irreversíveis, no entanto, não estão relacionados a distribuições do tipo Boltzmann para tempos longos, uma vez que sua dimensão é pequena, mas em gerar um tempo infinito para que a energia retorne do ambiente para o sistema de interesse [34], como ocorre no caso do modelo Caldeira-

Leggett. Baseado nisto, se estabelece uma relação entre o modelo Caldeira-Leggett e o acoplamento com um sistema caótico de baixa dimensionalidade [33], uma vez que ambos são capazes de descrever efeitos semelhantes.

Baseado no modelo Caldeira-Leggett e no modelo de banhos caóticos de baixa dimensionalidade, o que se observa de uma forma geral, é que tanto o número de graus de liberdade do ambiente externo quanto o seu regime dinâmico, são elementos fundamentais na descrição de como o sistema alcança o equilíbrio. Isto significa que ambos os fatores influenciam nos processos dissipativos, tornando a dissipação uma função das propriedades do banho.

Com esta ideia, o principal objetivo deste trabalho é descrever os elementos responsáveis pela dissipação da energia de um oscilador harmônico acoplado a um banho constituído de N osciladores quárticos que podem apresentar dinâmica caótica [32]. Utilizando a Teoria da Resposta Linear, que é um método para calcular a função distribuição fora do equilíbrio, obtem-se uma equação analítica para o movimento do sistema, onde o termo dissipativo está associado as características do banho e a frequência do sistema. Este termo de dissipação, possui um comportamento constante e um elemento de memória, o qual desaparece para tempos longos. As ferramentas da dinâmica não linear são então aplicadas ao sistema dinâmico dos elementos microscópicos do banho, tornando possível descrever sua dinâmica em termos dos seus Expoentes de Lyapunov, os quais são elementos capazes de caracterizar se a dinâmica do elemento do banho é caótica. Unindo os dois resultados, obtemos a dissipação em termos dos Expoentes de Lyapunov do banho, mostrando que a dissipação apenas ocorre para um banho cuja dinâmica é caótica. Assim, dentro do contexto de banhos caóticos constituídos de um número N de elementos bidimensionais, o que fazemos é relacionar os elementos que descrevem o sistema de interesse e a dinâmica do banho com efeitos dissipativos.

Para fornecer ao leitor uma uma sequência de como pretendemos desenvolver nosso trabalho, seguimos os seguintes passos. No Cap. 2, apresentamos uma coletânea de conceitos da dinâmica não linear, os quais serão utilizados na caracterização do comportamento do sistema utilizado como elemento microscópico do banho. No Cap. 3, descrevemos a equação de Langevin e o modelo proposto por Caldeira-Leggett para descrever o ambiente externo. No Cap. 4 estão descritas as propriedades de banhos caóticos de baixa dimensionalidade. No Cap. 5, apresentamos os resultados deste trabalho. Por fim, no Cap. 6, estão as conclusões.

Revisão Teórica

Neste capítulo apresentaremos alguns conceitos relacionados a sistemas dinâmicos e à dinâmica não-linear, os quais servirão como base no estudo da dinâmica do sistema caótico utilizado como elemento microscópico do banho. A descrição é feita seguindo a Ref. [36].

2.1 Sistemas Dinâmicos

Um sistema dinâmico é um conjunto de equações cujas soluções mostram a evolução do sistema no tempo. O tempo pode tanto ser uma variável contínua, quanto uma variável discreta. Um exemplo de sistema dinâmico no qual o tempo é uma variável contínua, é um sistema de n equações diferenciais ordinárias, autônomas, de primeira ordem, dado por

$$\begin{aligned}
 \frac{dx^{(1)}}{dt} &= F_1(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(n)}), \\
 \frac{dx^{(2)}}{dt} &= F_2(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(n)}), \\
 &\vdots \\
 \frac{dx^{(n)}}{dt} &= F_n(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(n)}),
 \end{aligned}
 \tag{2.1}$$

que pode ser escrito de forma compacta, utilizando notação vetorial, como

$$\frac{d\vec{x}(t)}{dt} = \vec{F}[\vec{x}(t)],
 \tag{2.2}$$

onde \vec{x} representa o estado do sistema em um tempo t , e é um vetor n -dimensional, e \vec{F} uma função da variável \vec{x} . Este conjunto de equações representa um sistema dinâmico pois, para um estado inicial $\vec{x}(0)$, em princípio podemos sempre resolver as equações e obter o estado $\vec{x}(t)$ do sistema para qualquer $t > 0$. A Fig. 2.1 mostra o caminho seguido pelo sistema quando ele evolui no tempo, para o caso em que $n = 3$. O espaço $(x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)})$ da figura, gerado pelas variáveis do sistema, é chamado espaço de fase ou espaço das variáveis. O caminho seguido pelo sistema no espaço de fase, quando ele evolui no tempo, é chamado órbita ou trajetória. Para sistemas dinâmicos de tempo contínuo é comum referir-se a estas órbitas como fluxos.

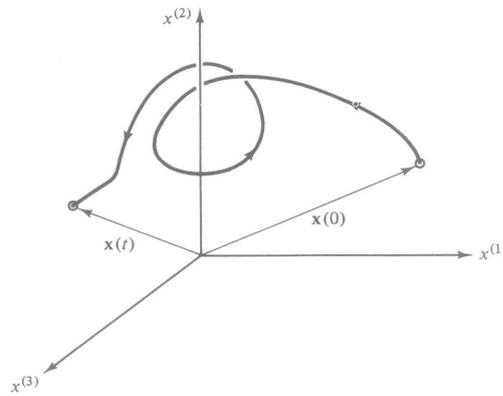


Figura 2.1: Órbita em um espaço de fase tridimensional.

No caso de sistemas discretos, o tempo assume valores inteiros, ou seja, $t = 1, 2, 3, \dots$. Um exemplo de um sistema dinâmico a tempo discreto é um mapa, o qual escrevemos na forma vetorial como

$$\vec{x}_{t+1} = \vec{M}(\vec{x}_t) \quad (2.3)$$

onde $\vec{x}_t = (x_t^{(1)}, x_t^{(2)}, \dots, x_t^{(n)})$ é um vetor n -dimensional e \vec{M} uma função de \vec{x}_t . Dado um estado inicial \vec{x}_0 , obtemos o estado em $t = 1$ fazendo $\vec{x}_1 = \vec{M}(\vec{x}_0)$. Tendo determinado \vec{x}_1 , determinamos \vec{x}_2 fazendo $\vec{x}_2 = \vec{M}(\vec{x}_1)$, e assim sucessivamente. Assim, dada uma condição inicial \vec{x}_0 , geramos a órbita (ou trajetória) seguida pelo sistema a tempo discreto: $\vec{x}_0, \vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots$.

Um sistema dinâmico a tempo contínuo pode ser reduzido a um sistema dinâmico a tempo discreto, utilizando-se uma técnica chamada Método da Seção de Poincaré, que passamos a descrever. Sejam n equações diferenciais ordinárias, autônomas, de primeira ordem (Eq. (2.2)). O Mapa de Poincaré representa uma redução deste fluxo no espaço

n -dimensional a um mapa no espaço $(n - 1)$ -dimensional. Para ilustrar o método, fazemos $n = 3$.

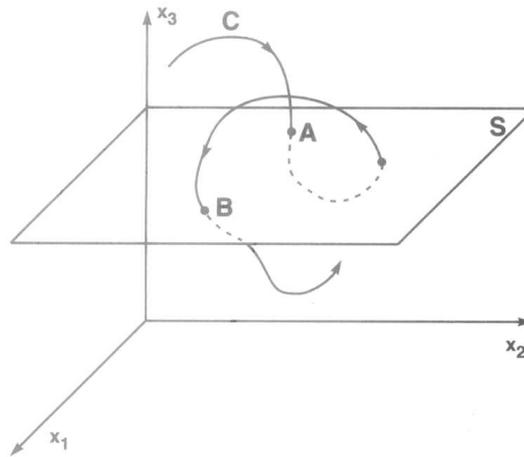


Figura 2.2: Seção de Poincaré.

Na Fig. 2.2, a seção de Poincaré é o plano bidimensional \mathbf{S} em $x^{(3)} = \text{constante}$. Os pontos A e B representam duas intersecções sucessivas da trajetória seguida pelo sistema com a seção quando o fluxo passa por ela no mesmo sentido. Dado o ponto A, utilizando a Eq. (2.2), determinamos a posição do ponto B, pois A pode ser usado como condição inicial para determinar B. Da mesma forma, B determina A se voltarmos o tempo na mesma equação, usando B como condição inicial. Assim, o mapa de Poincaré, nesta ilustração, é a sequência de pontos nos quais o fluxo intercepta a seção de Poincaré no mesmo sentido, e representa um mapa bidimensional inversível que transforma as coordenadas $(x_n^{(1)}, x_n^{(2)})$ da i -ésima perfuração da seção, nas coordenadas $(x_{n+1}^{(1)}, x_{n+1}^{(2)})$ da perfuração $(i + 1)$.

2.2 Sistemas Dinâmicos Conservativos

A dinâmica de sistemas Hamiltonianos é completamente especificada por uma única função escalar, o Hamiltoniano $H(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)$. O estado de tais sistemas é especificado por seus vetores momento \mathbf{p} e posição \mathbf{q} , que possuem a mesma dimensionalidade, a qual chamamos N . N é também o número de graus de liberdade do sistema. Por exemplo, as equações de Hamilton para o movimento de K massas pontuais que interagem em um espaço tridimensional, via atração gravitacional, tem $N = 3K$ graus de liberdade, correspondendo a três coordenadas espaciais necessárias para especificar a localização de

cada massa. As equações de Hamilton [37], determinam a trajetória $(\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t))$ que o sistema segue no espaço de fases $2N$ -dimensional, e são dadas por

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\partial H(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)}{\partial \mathbf{q}}, \quad (2.4a)$$

$$\frac{d\mathbf{q}}{dt} = \frac{\partial H(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)}{\partial \mathbf{p}}. \quad (2.4b)$$

No caso especial em que o Hamiltoniano não possui dependência explícita no tempo, podemos usar as equações de Hamilton para mostrar que $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ permanece constante no tempo, ou seja:

$$\frac{dH(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{dt} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \frac{\partial H(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{\partial \mathbf{p}} + \frac{d\mathbf{q}}{dt} \frac{\partial H(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} \quad (2.5)$$

$$= -\frac{\partial H(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} \frac{\partial H(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{\partial \mathbf{p}} + \frac{\partial H(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial H(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} = 0 \quad (2.6)$$

Se o Hamiltoniano $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ for identificado como a energia E do sistema, $H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = E$, isto implica na conservação da energia, ou seja, $H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = E = \text{constante}$ [36].

Outra particularidade de sistemas Hamiltonianos, é que suas equações do movimento podem ser escritas como:

$$\frac{d\tilde{\mathbf{x}}}{dt} = \mathbf{F}(\tilde{\mathbf{x}}, t), \quad (2.7)$$

onde $\tilde{\mathbf{x}}$ é um vetor $2N$ -dimensional dado por

$$\tilde{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \mathbf{p} \\ \mathbf{q} \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

Assim, $\mathbf{F}(\tilde{\mathbf{x}}, t)$ assume a forma

$$\mathbf{F}(\tilde{\mathbf{x}}, t) = \mathbf{S}_N \cdot \frac{\partial H}{\partial \tilde{\mathbf{x}}}, \quad (2.9)$$

onde

$$\mathbf{S}_N = \begin{bmatrix} \mathbf{O}_N & -\mathbf{I}_N \\ \mathbf{I}_N & \mathbf{O}_N \end{bmatrix}, \quad (2.10)$$

com \mathbf{I}_N representando uma matriz identidade N -dimensional, \mathbf{O}_N uma matriz $N \times N$ de

zeros e

$$\frac{\partial H}{\partial \tilde{\mathbf{x}}} = \begin{bmatrix} \partial H / \partial \mathbf{p} \\ \partial H / \partial \mathbf{q} \end{bmatrix}. \quad (2.11)$$

Esta descrição permite observar diretamente uma das principais características de sistemas Hamiltonianos: enquanto um sistema físico geral é descrito especificando todas as componentes vetoriais de (2.7), sistemas Hamiltonianos são descritos apenas especificando uma única função escalar, a Hamiltoniana.

Além disso, outra característica básica de sistemas Hamiltonianos independentes do tempo, é que eles preservam o volume no espaço de fase $2N$ -dimensional [36]. Tal fato é comprovado tomando o divergente de $\mathbf{F}(\tilde{\mathbf{x}})$ na Eq. (2.7):

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{\mathbf{x}}} \cdot \mathbf{F} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \cdot \left(-\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \cdot \left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \right) = 0. \quad (2.12)$$

Assim, se considerarmos uma superfície fechada S_0 no espaço de fase $2N$ -dimensional, e evoluirmos cada ponto desta superfície no tempo, obteremos uma nova superfície S_t , a qual contém o mesmo volume de S_0 . Isto também pode ser comprovado calculando a derivada temporal do volume ocupado no espaço de fase pela superfície S_t :

$$\frac{d}{dt} \int_{S_t} d^{2N} \tilde{\mathbf{x}} = \oint_{S_t} \frac{d\tilde{\mathbf{x}}}{dt} \cdot d\mathbf{S} = \oint_{S_t} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S} = \int_{S_t} \frac{\partial}{\partial \tilde{\mathbf{x}}} \cdot \mathbf{F} d^{2N} \tilde{\mathbf{x}} = 0, \quad (2.13)$$

onde $\int_{S_t} \dots$ representa uma integral sobre o volume envolvido por S_t , $\oint_{S_t} \dots$ é uma integral de superfície sobre S_t e a terceira igualdade é devido ao teorema do divergente [36]. Esta incompressibilidade do volume do espaço de fase é denominada Teorema de Liouville [36, 37].

Outra, e talvez a mais importante, propriedade estrutural das equações de Hamilton, é que elas podem ser escritas de uma forma simplética [36]:

$$\frac{d\tilde{\mathbf{x}}}{dt} = \mathbf{S}_N \cdot \frac{\partial H}{\partial \tilde{\mathbf{x}}}, \quad (2.14)$$

onde \mathbf{S}_N é a matriz simplética (2.10). Uma propriedade importante de \mathbf{S}_N é obtida considerando três órbitas infinitesimalmente separadas uma das outras e dadas por: $(\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t))$, $(\mathbf{p}(t) + \delta\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t) + \delta\mathbf{q}(t))$ e $(\mathbf{p}(t) + \delta\mathbf{p}'(t), \mathbf{q}(t) + \delta\mathbf{q}'(t))$, onde $\delta\mathbf{p}(t)$, $\delta\mathbf{q}(t)$, $\delta\mathbf{p}'(t)$ e $\delta\mathbf{q}'(t)$ são vetores infinitesimais N -dimensionais. A quantidade

$$\delta\mathbf{p}(t)\delta\mathbf{q}'(t) - \delta\mathbf{q}(t)\delta\mathbf{p}'(t), \quad (2.15)$$

a qual chamamos área simplética, é independente do tempo, ou seja

$$\frac{d}{dt} (\delta \mathbf{p}(t) \delta \mathbf{q}'(t) - \delta \mathbf{q}(t) \delta \mathbf{p}'(t)) = 0. \quad (2.16)$$

A área simplética diferencial pode ainda ser escrita como:

$$\delta \mathbf{p}(t) \delta \mathbf{q}'(t) - \delta \mathbf{q}(t) \delta \mathbf{p}'(t) = \delta \tilde{\mathbf{x}}^\dagger \cdot \mathbf{S}_N \cdot \delta \tilde{\mathbf{x}}', \quad (2.17)$$

onde \dagger denota transposta.

Para obter a Eq. (2.16), diferenciamos a Eq. (2.17) em relação ao tempo e usamos as Eqs. (2.7)-(2.11):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (\delta \tilde{\mathbf{x}}^\dagger \cdot \mathbf{S}_N \cdot \delta \tilde{\mathbf{x}}') &= \frac{d\delta \tilde{\mathbf{x}}^\dagger}{dt} \cdot \mathbf{S}_N \cdot \delta \tilde{\mathbf{x}}' + \delta \tilde{\mathbf{x}}^\dagger \cdot \mathbf{S}_N \cdot \frac{d\delta \tilde{\mathbf{x}}'}{dt}, \\ &= \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \tilde{\mathbf{x}}} \cdot \delta \tilde{\mathbf{x}} \right)^\dagger \cdot \mathbf{S}_N \cdot \delta \tilde{\mathbf{x}}' + \delta \tilde{\mathbf{x}}^\dagger \cdot \mathbf{S}_N \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \tilde{\mathbf{x}}} \cdot \delta \tilde{\mathbf{x}}' \right), \\ &= \delta \tilde{\mathbf{x}}^\dagger \cdot \left[\left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \tilde{\mathbf{x}}} \right)^\dagger \cdot \mathbf{S}_N + \mathbf{S}_N \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \tilde{\mathbf{x}}} \right) \right] \cdot \delta \tilde{\mathbf{x}}', \\ &= \delta \tilde{\mathbf{x}}^\dagger \cdot \left[\left(\mathbf{S}_N \cdot \frac{\partial^2 H}{\partial \tilde{\mathbf{x}} \partial \tilde{\mathbf{x}}} \right)^\dagger \cdot \mathbf{S}_N + \mathbf{S}_N \cdot \mathbf{S}_N \cdot \left(\frac{\partial^2 H}{\partial \tilde{\mathbf{x}} \partial \tilde{\mathbf{x}}} \right) \right] \cdot \delta \tilde{\mathbf{x}}', \\ &= \delta \tilde{\mathbf{x}}^\dagger \cdot \left[\left(\frac{\partial^2 H}{\partial \tilde{\mathbf{x}} \partial \tilde{\mathbf{x}}} \right) \mathbf{S}_N^\dagger \cdot \mathbf{S}_N + \mathbf{S}_N \cdot \mathbf{S}_N \cdot \left(\frac{\partial^2 H}{\partial \tilde{\mathbf{x}} \partial \tilde{\mathbf{x}}} \right) \right] \cdot \delta \tilde{\mathbf{x}}', \\ &= 0, \end{aligned} \quad (2.18)$$

onde usamos $\mathbf{S}_N^\dagger \cdot \mathbf{S}_N = -\mathbf{I}_{2N}$ (\mathbf{I}_{2N} é uma matriz identidade $2N$ -dimensional), $\mathbf{S}_N^\dagger = -\mathbf{S}_N$ e consideramos $\partial^2 H / \partial \tilde{\mathbf{x}} \partial \tilde{\mathbf{x}}$ uma matriz simétrica. Logo, uma matriz simplética satisfaz as seguintes condições [38]:

$$\mathbf{S}_N^{-1} = \mathbf{S}_N^\dagger = -\mathbf{S}_N \quad (2.19)$$

e

$$\det(\mathbf{S}_N) = 1, \quad (2.20)$$

que poderiam ser obtidas diretamente da Eq. (2.10)

Sistemas simpléticos apresentam uma grande quantidade de propriedades [38], mas a de maior relevância neste trabalho, é que eles conservam o volume no espaço de fase $2N$ -dimensional, ou seja, sistemas dinâmicos simpléticos estão sujeitos ao Teorema de

Liouville [36].

O fato de um sistema Hamiltoniano conservar o volume no espaço de fase, acarreta algumas consequências, entre as quais destacamos aqui o Teorema de Recorrência de Poincaré [39, 40]. Ao considerar o movimento do sistema em uma região limitada do espaço de fases, a qual denotamos Γ , se definirmos uma pequena área A dentro desta região (Fig. 2.3), com volume $\Gamma_A < \Gamma$, podemos obter um conjunto de valores de tempo $\{t_j\}$ para os quais o fluxo cruza esta região de dentro para fora. Os intervalos de tempo

$$\tau_j = t_{j+1} - t_j, \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (2.21)$$

são os ciclos de Poincaré e t_j , os Tempos de Recorrência de Poincaré. Poincaré provou

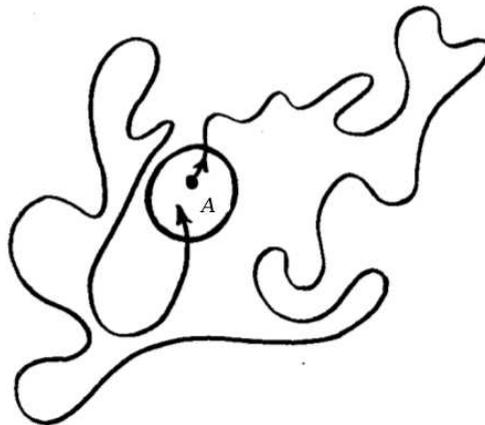


Figura 2.3: Trajetória em uma região limitada do espaço de fase cruzando a área A de volume Γ_A . Figura retirada da Ref. [40].

que para um movimento em uma região finita do espaço e que cujo volume é preservado, toda trajetória deveria retornar a uma região previamente determinada (por exemplo A na Fig. 2.3) em um tempo finito e um número infinito de vezes. Uma exceção ocorre somente se A é um conjunto de dimensão zero [39, 40].

Assim, foram descritas algumas propriedades gerais de sistemas dinâmicos Hamiltonianos. Isto ocorreu sem levar em consideração seu movimento, ou seja, sua dinâmica. Nas próximas seções, esta questão passa a ganhar espaço, focando a atenção em algumas características de sua dinâmica, mais especificamente quando ocorre a presença de movimento regular, caótico ou uma mistura de ambos.

2.3 Sistemas Integráveis

Conforme observado na Sec. 2.2, nos casos onde o Hamiltoniano não tem dependência explícita no tempo, $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$, as equações de Hamilton implicam em $dH/dt = 0$ e a energia é uma constante do movimento. Uma função $f(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ também será conservada, se, enquanto $\mathbf{p}(t)$ e $\mathbf{q}(t)$ evoluem no tempo, $f(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ não se altera. Assim, se diferenciarmos $f(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ com respeito ao tempo e considerarmos que não existe dependência temporal explícita no Hamiltoniano,

$$\frac{df}{dt} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} + \frac{d\mathbf{q}}{dt} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{q}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \frac{df}{d\mathbf{q}} - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \frac{df}{d\mathbf{p}} = 0. \quad (2.22)$$

O lado direito da segunda igualdade da Eq. (2.22) é chamado de Colchete de Poisson de f e H [37], e o abreviamos como $\{f, H\}$. Utilizando esta definição, temos a condição para uma função f ser uma constante de movimento quando o Hamiltoniano não depende do tempo [39]:

$$\{f, H\} = 0. \quad (2.23)$$

Para um sistema com N graus de liberdade ser integrável, no sentido de Liouville, é necessário que existam N constantes independentes de movimento $f_i(\mathbf{p}, \mathbf{q})^1$, com $i = 1, 2, \dots, N$, de forma que

$$\{f_i, H\} = 0 \quad (2.24)$$

e

$$\{f_i, f_j\} = 0, \quad (2.25)$$

para todo i e j [39]. Além disso, os vetores \mathbf{v}_i definidos por

$$\mathbf{v}_i = \nabla f_i, \quad (2.26)$$

onde $\nabla = (\partial/\partial q_1, \dots, \partial/\partial q_N, \partial/\partial p_1, \dots, \partial/\partial p_N)$ é o operador nabla no espaço de fase, devem ser linearmente independentes em todos os pontos do espaço de fase [41]. Se as condições (2.24), (2.25) e (2.26) valem para todos i e j , então dizemos que as N constantes do movimento estão em involução.

¹Se uma das constantes não pode ser escrita como uma função das outras, então serão chamadas “independentes” [36].

Quando um sistema Hamiltoniano N dimensional e integrável possui N constantes independentes de movimento, a topologia da superfície sobre a qual suas trajetórias evoluem no espaço de fase ficam restritas a um torus N dimensional [39]. Para o caso $N = 2$, uma órbita sobre um torus é apresentada na Fig. 2.4.

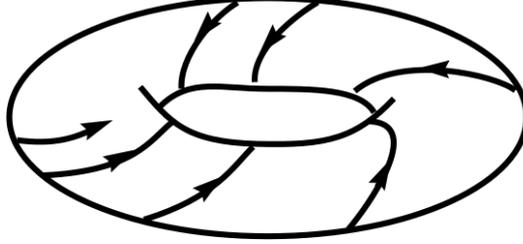


Figura 2.4: Trajetória sobre um torus para um sistema bidimensional com duas constantes do movimento. Figura retirada da Ref. [42].

Uma descrição mais simples do movimento de sistemas Hamiltonianos integráveis, sobre torus N dimensionais, pode ser feita utilizando a descrição em termos de variáveis ângulo-ação e as equações de Hamilton-Jacobi, cujo formalismo pode ser encontrado na Ref. [37]. Para isso, introduz-se uma mudança canônica de variáveis $(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \rightarrow (\bar{\mathbf{p}}, \bar{\mathbf{q}})$, tal que o Hamiltoniano \bar{H} dependa somente de $\bar{\mathbf{p}}$ e não de $\bar{\mathbf{q}}$. Desta forma, as equações de Hamilton com o novo Hamiltoniano tornam-se

$$\frac{d\bar{\mathbf{p}}}{dt} = -\frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{\mathbf{q}}} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{d\bar{\mathbf{q}}}{dt} = \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{\mathbf{p}}}, \quad (2.27)$$

e $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ passa a ser escrito como $\bar{H}(\bar{\mathbf{p}})$.

Utilizando as variáveis ângulo-ação, escrevemos as componentes do momento $\bar{\mathbf{p}}$ e das coordenadas generalizadas $\bar{\mathbf{q}}$ como

$$(\bar{\mathbf{p}}, \bar{\mathbf{q}}) = (\mathbf{I}, \boldsymbol{\theta}), \quad (2.28)$$

onde as componentes I_i da ação são definidas por [36]

$$I_i = \frac{1}{2\pi} \oint p_i dq_i \quad \text{onde} \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (2.29)$$

Desta forma, estamos escrevendo as componentes de $\bar{\mathbf{p}}$ como sendo as N constantes do movimento e ao mesmo tempo satisfazendo a Eq. (2.27), uma vez que a variação temporal de uma constante do movimento é zero.

Para fazer a mudança de variáveis $(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \rightarrow (\mathbf{I}, \boldsymbol{\theta})$, utilizamos a função geradora $S(\mathbf{I}, \mathbf{q})$

juntamente com as relações [36]

$$\boldsymbol{\theta} = \frac{\partial S(\mathbf{I}, \mathbf{q})}{\partial \mathbf{I}} \quad \text{e} \quad \mathbf{p} = \frac{\partial S(\mathbf{I}, \mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} \quad (2.30)$$

pois esta função relaciona as “velhas” coordenadas de posição \mathbf{q} e o “novo” momento \mathbf{I} [36]. Com isso, podemos construir a função Hamiltoniana em termos das variáveis ângulo-ação, $H(\mathbf{I})$, a qual é independente de $\boldsymbol{\theta}$.

Como citado no parágrafo anterior, a nova Hamiltoniana é independente de $\boldsymbol{\theta}$ e as equações de Hamilton, Eq (2.27), podem ser escritas como

$$\frac{d\mathbf{I}}{dt} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{d\boldsymbol{\theta}}{dt} = \frac{\partial \bar{H}(\mathbf{I})}{\partial \mathbf{I}} \equiv \boldsymbol{\omega}(\mathbf{I}), \quad (2.31)$$

cujas soluções são

$$\mathbf{I}(t) = \mathbf{I}(0) \quad (2.32)$$

e

$$\boldsymbol{\theta}(t) = \boldsymbol{\theta}(0) + \boldsymbol{\omega}(\mathbf{I})t, \quad (2.33)$$

onde cada variável ângulo é periódica com período 2π .

Pode-se interpretar a segunda equação em (2.31) como um vetor velocidade angular especificando trajetórias sobre o torus N dimensional [36], onde \mathbf{I} representa o raio da trajetória e $\boldsymbol{\theta}$ o ângulo de rotação. Tal fato é ilustrado na Fig. 2.5 para o caso em que $N = 2$.

Com a interpretação de $\boldsymbol{\omega}(\mathbf{I})$ como um vetor velocidade angular que especifica diferentes trajetórias sobre um torus N -dimensional, diferentes tipos de movimento sobre o torus podem ocorrer, podendo ser este periódico ou quase-periódico, dependendo da razão entre estas frequências. Se existir um vetor N -dimensional de números inteiros $\mathbf{m} = (m_1, m_2, \dots, m_n)$, tal que

$$\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\omega} = 0, \quad (2.34)$$

exceto quando \mathbf{m} é um vetor com todas as componentes nulas, o movimento sobre o torus é um movimento periódico e a razão ω_1/ω_i é um número racional. Nestes casos, as órbitas seguidas pelo sistema fecham sobre elas mesmas após m_1 ciclos em θ_1 , m_2 ciclos em θ_2 e assim sucessivamente [36]. Já quando a condição (2.34) não for satisfeita e ω_1/ω_i for

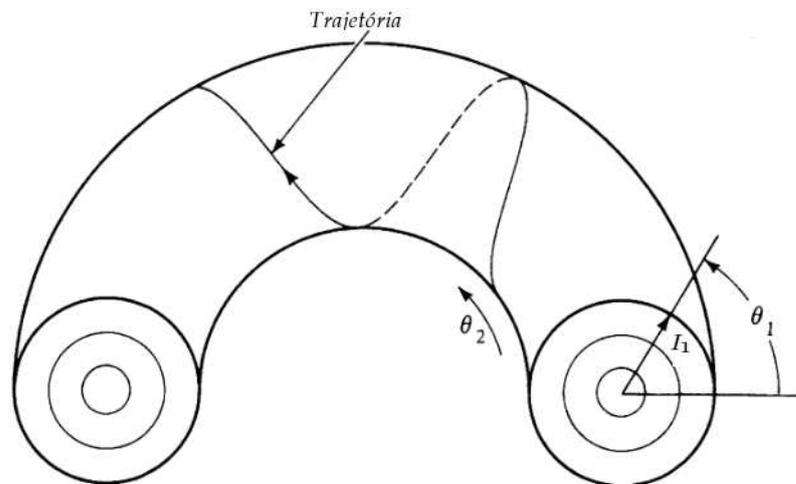


Figura 2.5: Trajetória sobre um torus bidimensional. I_1 representa o raio e θ_1 o ângulo descrito em uma destas trajetórias circulares. Figura retirada da Ref. [43].

um número irracional, o movimento do sistema é chamado quase-periódico e uma órbita jamais retorna ao seu ponto inicial, preenchendo completamente a superfície do torus [36].

Quando um sistema integrável passa a sofrer a ação de uma perturbação, toros cuja razão entre as frequências é um número racional ou irracional, comportam-se de maneiras diferentes. As consequências desta perturbação sobre tais toros é explicada pelo teorema KAM, o qual veremos agora.

2.4 O Teorema KAM

Na Sec. 2.3, apresentamos as condições necessárias para um sistema ser integrável. Também verificamos, que quando o Hamiltoniano é escrito em termos das constantes de movimento, em especial em relação as variáveis ângulo-ação, o movimento do sistema é limitado a um torus N dimensional racional ou irracional, dependendo das frequências do movimento. Mas até onde vai a integrabilidade de um sistema Hamiltoniano? Ou ainda, o que acontece com os toros racionais e irracionais quando um sistema Hamiltoniano integrável é sujeito a uma perturbação? As respostas para estas questões vieram com os rigorosos trabalhos matemáticos de Kolmogorov, Arnold e Moser (KAM) e com os estudos numéricos desenvolvidos sobre caos e integrabilidade após o advento dos computadores. Os resultados obtidos por Kolmogorov, Arnold e Moser ficaram conhecidos como Teorema KAM. Não será detalhada aqui a dedução do Teorema, pois foge do objetivo deste trabalho, mas apenas serão apresentados os seus resultados.

Para descrever o teorema KAM, consideramos um sistema Hamiltoniano perturbado, escrito em termos das variáveis ângulo-ação como:

$$H(\mathbf{I}, \boldsymbol{\theta}) = H_0(\mathbf{I}) + \epsilon H_1(\mathbf{I}, \boldsymbol{\theta}), \quad (2.35)$$

onde $H_0(\mathbf{I})$ é o Hamiltoniano integrável, $H_1(\mathbf{I}, \boldsymbol{\theta})$ a perturbação e $(\mathbf{I}, \boldsymbol{\theta})$ as variáveis ângulo-ação do sistema não perturbado.

A ideia principal do Teorema KAM é considerar o efeito da perturbação sobre Torus invariantes² ao invés de trajetórias no espaço de fase [39]. Desta forma, vamos dividir a discussão em dois casos, os Torus Racionais e os Torus Irracionais. Veremos que muitos torus sobrevivem a pequenas perturbações, enquanto outros destroem-se, dando origem a órbitas caóticas, novos torus e também pontos elípticos e hiperbólicos.

2.4.1 Toros Racionais

Denominamos Toros Racionais aqueles cuja razão entre as frequências dadas pela Eq. (2.31) é um número racional. Como resultado da ação da perturbação, estes Torus são destruídos por menores que sejam os valores de ϵ [36]. Devido a destruição dos Torus Racionais, ocorre o aparecimento de um igual número de pontos fixos elípticos e hiperbólicos. Este resultado é conhecido como teorema de Poincaré-Birkhoff [43].

O número de pontos fixos que aparecem depende da razão entre as frequências do Torus racional. Se chamarmos $R = \tilde{p}/\tilde{q}$ o número de rotação do Torus, onde \tilde{q} representa o maior número de ciclos executado sobre o torus antes da trajetória retornar sobre ela mesma, então, devido a perturbação, aparecerá um número igual ou múltiplo de \tilde{q} de pontos elípticos e de pontos hiperbólicos [36]. A Fig. 2.6 ilustra um caso $\tilde{q} = 3$ e $\tilde{q} = 4$ em uma seção de Poincaré para um sistema com $N = 2$.

Estes pontos elípticos e hiperbólicos que advém da quebra do Torus racional devido a perturbação, continuam sendo pontos fixos do sistema perturbado e com o mesmo período \tilde{q} do Torus racional [43]. A diferença entre os dois pontos está na forma como condições iniciais próximas a eles se comportam.

Próximo a pontos fixos elípticos, ocorre o aparecimento de novas curvas semelhantes as que existiam antes da perturbação, a qual chamamos curvas KAM, sendo algumas destas racionais e outras irracionais. Tal fato é apresentado dentro da caixa tracejada

²Um torus é chamado de invariante, se uma vez que movimento do sistema inicie sobre ele, ali irá permanecer [36].

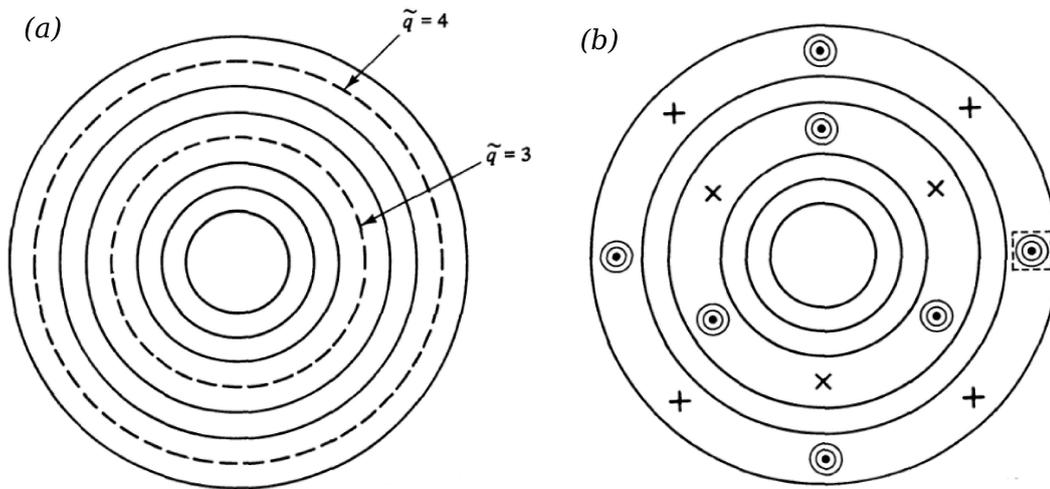


Figura 2.6: Ilustração do Teorema de Poincaré-Birkhoff. (a) Sistema integrável sem a ação da perturbação. As linhas tracejadas indicam torus racionais com $\tilde{q} = 3$ e $\tilde{q} = 4$. (b) Aparecimento dos pontos elípticos e hiperbólicos devido a ação da perturbação. Os pontos elípticos são representados pelos círculos concêntricos. Figuras retiradas da Ref. [36].

da Fig. 2.6(b). Quando estas curvas KAM racionais que apareceram devido a ação da perturbação são destruídas, outros pontos elípticos e hiperbólicos irão aparecer, rodeados novamente por curvas KAM racionais e irracionais e assim sucessivamente [36].

Órbitas geradas próximo a pontos hiperbólicos, podem ter diferentes comportamentos, pois pontos hiperbólicos, também conhecidos como pontos de sela, possuem direções ou variedades estáveis, aquelas que movem-se para o ponto fixo, ou instáveis, aquelas que movem-se afastando-se dele [36]. Se seguirmos as variedades, afastando-se de um ponto fixo, elas geralmente apresentarão intersecções homoclínicas ou heteroclínicas, que ocorrem quando variedades instáveis de um mesmo ponto se cruzam sobre ele mesmo ou de dois diferentes pontos se cruzam em pontos diferentes, respectivamente [36]. A Fig. 2.7 representa estes cruzamentos para um único ponto e para dois pontos hiperbólicos distintos.

Assim, a destruição dos torus racionais além de gerar pontos elípticos estáveis, também gera pontos hiperbólicos, os quais são os responsáveis pelo movimento caótico, que se mantém sempre aprisionado por curvas KAM que ainda não foram “quebradas” [36], pelo menos para um caso $N = 2$. A medida que estas curvas vão se “quebrando”, mais e mais regiões caóticas vão aparecendo, preenchendo completamente de pontos a região permitida da seção de Poincaré. Veremos agora qual é a sequência em que os torus irracionais vão dando origem aos pontos elípticos e hiperbólicos.

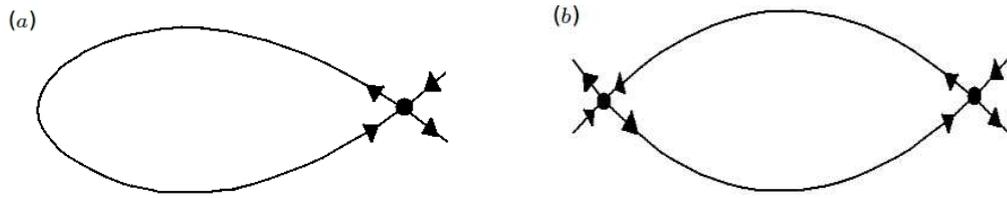


Figura 2.7: Pontos hiperbólicos. (a) Cruzamento homoclínico, onde as variedades instáveis tornam-se variedade estáveis quando se cruzam novamente no ponto. (b) Cruzamentos heteroclínicos, onde as variedades instáveis de um ponto tornam-se variedades estáveis quando cruzam outro ponto.

2.4.2 Torus Irracionais

Quando um sistema integrável é perturbado, o Teorema KAM garante a existência de Torus no espaço de fase, caso satisfeitas as condições abaixo:

- i As frequências lineares dos Torus do sistema integrável são independentes [43], ou seja, temos um Torus cuja razão entre as frequências é um número irracional;
- ii A perturbação é uma função suave [43] (um número suficiente de derivadas de H_1);
- iii Condições iniciais suficientemente longe dos toros racionais [43].

Satisfeitas as condições acima, o Teorema KAM garante a existência de torus deformados, com a mesma topologia dos torus não perturbados, na vizinhança dos torus irracionais do sistema não perturbado. Estes torus que aparecem deformados após a perturbação, são chamados Torus KAM.

A última condição de que os Torus irracionais devem estar suficientemente longe dos toros racionais, para a existência dos Torus KAM, implica que quanto mais irracional for a razão entre as frequências do Torus não perturbado, mais fácil é o aparecimento dos Torus KAM [43].

A ideia de número mais irracional pode vir com a ajuda da teoria dos números. Um número irracional R pode ser representado como uma função infinita continuada [36]:

$$R = a_1 + \frac{1}{a_2 + \frac{1}{a_3 + \frac{1}{a_4 + \dots}}} \quad (2.36)$$

onde os a_i 's são números inteiros. Porém, se os inteiros a_i 's para $i \geq k$ são iguais a um, este número irracional é chamado de “nobre” [44]. O número “mais irracional” que existe

e conseqüentemente o mais “nobre” de todos [44], é o número de ouro

$$R = \frac{(\sqrt{5} - 1)}{2}. \quad (2.37)$$

Quando o número mais “nobre” de todos estiver relacionado com a irracionalidade de um Torus KAM, ele será o último deles a ser destruído à medida que a intensidade da perturbação aumenta. Contudo, caso ele não esteja presente, o último torus KAM a ser quebrado será aquele que apresentar o número mais “nobre” [44].

De uma forma geral, pode-se resumir o efeito da perturbação sobre um sistema integrável da seguinte forma: Quando a perturbação começa a atuar no sistema integrável, muitos Torus do sistema integrável são levemente deformados e sobrevivem (Torus irracionais), enquanto outros são destruídos (Torus racionais). Regiões próximas aos Torus que não foram destruídas pela perturbação ficam ocupadas por novas órbitas irracionais, pontos elípticos, órbitas hiperbólicas e órbitas caóticas. A medida que a perturbação aumenta, os Torus irracionais destroem-se, sendo o último deles a ser “quebrado”, aquele que tem o valor de razão entre as frequências como um número “mais nobre”.

Quando a perturbação sobre o sistema integrável quebra todos os toros, inclusive o mais nobre, o sistema passa a apresentar características como ergodicidade, queda de correlações, etc. Na próxima seção, descreveremos estas propriedades.

2.5 Transição para Estocasticidade Global

Na Sec. 2.4, verificamos o que ocorre com os torus no espaço de fase N -dimensional quando um sistema integrável passa a sofrer a ação de uma pequena perturbação. Agora, vamos verificar o que ocorre quando esta perturbação deixa de ser pequena e aumenta gradativamente. Para isso, vamos considerar um sistema bidimensional e sua seção de Poincaré, onde temos círculos concêntricos para o sistema integrável, gerados pela intersecção dos torus com a seção de Poincaré.

Quando a perturbação é ligada, aquelas curvas que eram relacionadas a torus racionais acabam sendo destruídas e dão origem a pontos elípticos e hiperbólicos. Próximo aos pontos fixos hiperbólicos, ocorre o aparecimento de regiões caóticas, que se limitam por curvas KAM. Já próximo aos pontos elípticos, ocorre o aparecimento de curvas KAM circundando estes pontos, os quais são chamados de ilhas.

Aumentando ainda mais a perturbação, as curvas KAM vão se tornando cada vez

menos irracionais, até se tornarem racionais e transformarem-se também em pontos elípticos e hiperbólicos, comportando-se da forma descrita no parágrafo anterior. À medida que a perturbação aumenta ainda mais, mais curvas KAM vão se destruindo, gerando o predomínio de movimento caótico, doravante denominado estocástico, o qual preenche uma certa região do espaço de fase a partir de uma única condição inicial [43].

Conforme observamos, a medida que a perturbação aumenta, vai ocorrendo o aparecimento de uma região maior de movimento caótico. Quando ocorre o predomínio de regiões regulares no espaço de fase, temos a estocasticidade local, diferentemente de quando as regiões predominantes do espaço de fase são regiões caóticas, onde temos a estocasticidade global [43].

Quando isto ocorre, e não existem curvas KAM no espaço de fase, passamos a tratar o sistema estatisticamente, descrevendo a evolução temporal de certas médias ao invés de trajetórias que correspondem a um certo conjunto de condições iniciais. Assim, consideramos algumas definições e conceitos básicos que são aplicáveis a movimentos estocásticos.

2.5.1 Ergodicidade

Consideremos um ponto \mathbf{x} do espaço de fase $2N$ dimensional e uma função observável f . Chamamos de média temporal da função f a expressão:

$$\bar{f}(\mathbf{x}) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(\mathbf{x}, t) dt. \quad (2.38)$$

Consideramos agora um ensemble de N condições iniciais \mathbf{x}_i^0 no espaço de fase, e a função $f(\mathbf{x}_i^0, t)$ ao longo de cada trajetória. Então,

$$\langle f(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\mathbf{x}_i^0, t) \quad (2.39)$$

é a média de ensemble da função f [39].

Um sistema dinâmico é dito ser ergódico se $\bar{f}(\mathbf{x}) = \langle f(x) \rangle$ [43]. Desta definição, concluímos que a média temporal da função não pode depender da condição inicial usada. Para isto ocorrer, é necessário que o sistema passe por todas as regiões do espaço de fase um número infinito de vezes. Isto exclui por exemplo um sistema que possui curvas KAM, que acabam dividindo o espaço de fase e não permitindo a visita de toda sua região por uma única trajetória [43].

Um sistema é considerado ergódico, dependendo do subespaço que consideramos. Um sistema Hamiltoniano autônomo não pode dar origem a um sistema ergódico em todo o espaço de fase, pois a energia é uma constante do movimento e limita a trajetória do sistema a uma superfície. Contudo, o fluxo pode ser ergódico sobre a superfície de energia. Desta forma, a ergodicidade é universal, basta apenas definir o subespaço sobre o qual ela existe [43].

2.5.2 Mistura ou “Mixing” e Decaimento da Correlação

O conceito de Mistura pode ser compreendido com um exemplo proposto por Arnold em [38] e exemplificado na referência [43]: Coloca-se 20% de rum e 80% de refrigerante em um recipiente, representando as distribuições iniciais de um fluido incompressível no espaço de fase. Depois de agitarmos o recipiente, qualquer amostra do volume, por menor que seja, irá possuir 20% de rum. Isto define um sistema misturado.

Uma forma de ilustrar o processo de mistura, é considerar uma gota no espaço de fase, conforme ilustrado na Fig. 2.8(a).

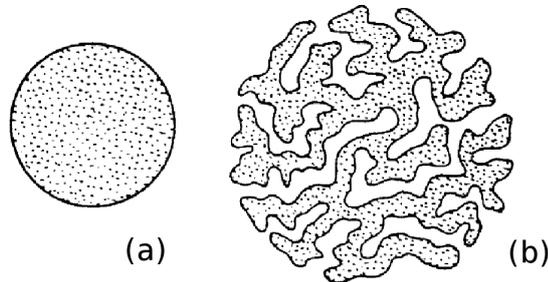


Figura 2.8: (a) Gota no espaço de fase. (b) Gota no espaço de fase após a evolução temporal para um sistema misturado. Figura retirada da Ref. [39].

Quando um sistema misturado evolui no tempo, a antiga gota toma a forma representada na Fig. 2.8(b). A medida que $t \rightarrow \infty$, o sistema se torna cada vez mais homogêneo [43] e conseqüentemente ergódico. Desta forma, mistura implica ergodicidade, mas o contrário nem sempre se aplica [43].

Outro fator relacionado a sistema misturados, é o decaimento da correlação entre duas funções observáveis. Vamos considerar duas funções $f(\mathbf{x})$ e $g(\mathbf{x})$. A função de correlação entre f e g é definida como [40]:

$$C(f, g; t) = \langle f(\mathbf{x}(t + \tau; \mathbf{x}^0))g(\mathbf{x}(\tau; \mathbf{x}^0)) \rangle - \langle f(\mathbf{x}) \rangle \langle g(\mathbf{x}) \rangle, \quad (2.40)$$

onde $\langle f(\mathbf{x}) \rangle$ e $\langle g(\mathbf{x}) \rangle$ não dependem do tempo se a dinâmica é ergódica. O valor da função de correlação depende do tempo e da escolha das funções f e g , e no caso de

$$\lim_{t \rightarrow \infty} C(f, g; t) = 0 \quad (2.41)$$

ser válida, o sistema possui a propriedade de mistura [39].

2.6 Expoentes de Lyapunov

Uma característica de sistemas que apresentam dinâmica caótica, é a dependência sensível exponencial nas condições iniciais. Para entender o que isto significa, deve-se considerar duas trajetórias inicialmente muito próximas, $\mathbf{x}_1(0)$ e $\mathbf{x}_2(0)$, tal que $\mathbf{x}_2(0) = \mathbf{x}_1(0) + \Delta(0)$, as quais evoluem no tempo gerando órbitas $\mathbf{x}_1(t)$ e $\mathbf{x}_2(t)$, conforme ilustrado na Fig. 2.9, de forma que a nova separação entre as órbitas em t será $\Delta(t) = \mathbf{x}_2(t) -$

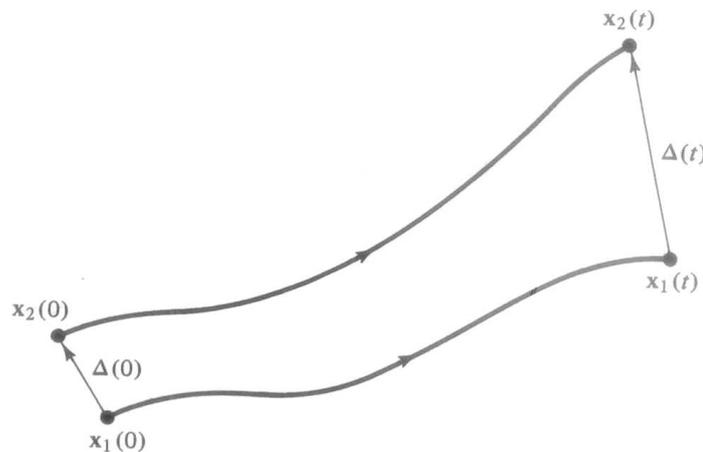


Figura 2.9: Órbitas $\mathbf{x}_1(t)$ e $\mathbf{x}_2(t)$ geradas para duas condições iniciais $\mathbf{x}_1(0)$ e $\mathbf{x}_2(0)$. Figura retirada da Ref. [36].

$\mathbf{x}_1(t)$. Considerando o limite em que $|\Delta(0)| \rightarrow 0$ e t é grande, se as órbitas permanecem limitadas no espaço de fase e a diferença entre elas cresce exponencialmente com o tempo, $\Delta(t) = \Delta(0)e^{ht}$ com $h > 0$, então dizemos que o sistema apresenta dependência sensível às condições iniciais e é caótico [36].

Se órbitas próximas representam estados quase idênticos de um sistema caótico, a divergência exponencial das condições iniciais gera soluções finais totalmente distintas, ou seja, estados finais completamente diferentes. Desta forma, torna-se impossível prever

o comportamento futuro de um sistema caótico utilizando uma única solução conhecida, mesmo que inicialmente próximas, pois seus estados, à medida que o sistema evolui no tempo, tornam-se completamente distintos.

A questão de quantificar em uma escala temporal a condição sobre a qual seus estados são totalmente diferente daqueles gerados para condições iniciais próximas, pode ser realizada utilizando-se os Expoentes de Lyapunov, uma vez que estes medem a taxa média de divergência exponencial de órbitas próximas no espaço de fase. Se o número de graus de liberdade de um sistema for maior do que três e suas trajetórias limitadas no espaço de fase, qualquer sistema contendo no mínimo um expoente de Lyapunov positivo é definido como sendo caótico [36].

Determina-se para um sistema dinâmico, cujo espaço de fase é N -dimensional, um Expoente de Lyapunov para cada um de seus eixos, isto é, N expoentes, o conjunto dos quais denominamos Espectro de Lyapunov. Para calcular o Espectro de Lyapunov [45], dado um sistema contínuo em um espaço de fase N -dimensional, monitoramos uma N -esfera de condições iniciais durante sua evolução temporal. Esta esfera irá transformar-se em uma N -elipse devido a deformação natural imposta pelo fluxo. O i -ésimo Expoente de Lyapunov do sistema é definido em termos do tamanho do eixo principal $p_i(t)$ da N -elipse:

$$\lambda_i = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \log_2 \frac{p_i(t)}{p_i(0)}, \quad (2.42)$$

onde os λ_i são ordenados do maior para o menor. Desta forma, os Expoentes de Lyapunov estão relacionados a expansão (positivos) ou contração (negativos) das diferentes direções do espaço de fase, conforme é ilustrado na Fig. 2.10 para $N = 2$.

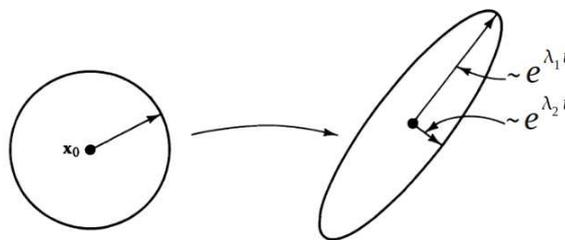


Figura 2.10: Bola de condições iniciais e elipse gerada pela evolução temporal do sistema.

Usando a Eq. (2.42), temos que o crescimento do i -ésimo eixo da N -elipse ocorre com $2^{\lambda_i t}$, uma área formada por dois eixos com $2^{(\lambda_1 + \lambda_2)t}$, o volume formado por três eixos

por $2^{(\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3)t}$ e assim sucessivamente. Esta propriedade fornece uma nova definição para o Espectro de Lyapunov: A soma dos primeiros j expoentes é definida pela taxa de crescimento exponencial, a tempos longos, do elemento de j -volume. Qualquer sistema dinâmico de tempo contínuo, terá no mínimo um expoente de Lyapunov igual a zero, correspondendo a lenta mudança de magnitude de um eixo tangente ao fluxo [45]. Eixos relacionados a expansão (contração) correspondem a expoentes positivos (negativos), como mencionado anteriormente, porém, a sua soma fornece a velocidade média de divergência do espaço de fase. Como uma consequência deste fato, para um sistema dinâmico Hamiltoniano, e cuja Hamiltoniana não depende do tempo, a soma dos Expoentes de Lyapunov é zero [36] e seu movimento ocorrerá sempre preservando o volume no espaço de fase, fato já mostrado na Sec. 2.2. Com isto, observando a Fig. 2.10, somos levados a concluir que λ_1 é positivo e λ_2 negativo, com a área do círculo inicial sendo igual a área da elipse final. Outra característica de sistemas conservativos, é que seus expoentes de Lyapunov aparecem aos pares e com igual magnitude, ou seja, $\pm h_1, \dots, \pm h_{N/2}$, onde N é a dimensão do sistema Hamiltoniano [36]. Devido a isto, eles satisfazem

$$\sum_{i=1}^N \lambda_i = 0. \quad (2.43)$$

Conforme se observou, os Expoentes de Lyapunov são definidos pela evolução temporal, para tempos longos, dos eixos de uma esfera infinitesimal de estados iniciais. Assim, para a obtenção do Espectro de Lyapunov, este procedimento poderia ser implementado definindo os eixos principais a partir de uma esfera de condições iniciais, cuja separação pode ser feita a partir da limitação de memória do computador, e estas trajetórias evoluídas com as equações não lineares do movimento. O problema deste procedimento, é que a orientação da N -elipse muda continuamente a medida que o sistema evolui e a direção associada a um dado expoente também varia de uma forma complicada. Com isso, não se pode falar de uma direção bem definida associada com um determinado expoente, o que coloca uma dificuldade na tentativa de calcular os Expoentes de Lyapunov diretamente utilizando a Eq. (2.42), conseqüentemente monitorando separadamente cada eixo da N -elipse [45]. Além deste problema, também temos o fato de que para um sistema caótico, não se pode garantir a condição de pequena separação a tempos longos, condição necessária para a convergência do espectro. Isto ocorre porque duas órbitas distintas seguem caminhos totalmente diferentes, e o módulo de sua separação pode superar os limites de memória do computador, tornando o cálculo impossível.

Embora tais problemas pareçam colocar uma grande dificuldade na determinação do

Espectro de Lyapunov, eles podem ser facilmente contornados. Isto é feito utilizando o formalismo do espaço de fase mais espaço tangente, que é um espaço das derivadas [45]. Para isso, uma trajetória “fiel” é definida a partir das equações não lineares do movimento. Esta trajetória representa a evolução do centro da esfera de condições iniciais. As trajetórias de pontos sobre a superfície e infinitesimalmente separados da trajetória “fiel”, são definidas a partir das equações linearizadas do movimento, que nada mais são do que as derivadas temporais das equações não lineares [45].

Os eixos principais que irão expandir ou contrair, dependendo do sinal do Expoente de Lyapunov, são obtidos definindo N bases compostas de N vetores inicialmente ortonormais e que são evoluídos no tempo a partir das equações linearizadas do movimento. Cada conjunto possui uma condição inicial diferente e, por definição, estão sempre infinitesimalmente separados em relação à trajetória “fiel” [45]. A Fig. 2.11 representa uma destas bases ortonormais próxima a trajetória “fiel” em um caso $N = 2$. Para este caso, um outro sistema ortonormal é definido, mas não é representado na figura.

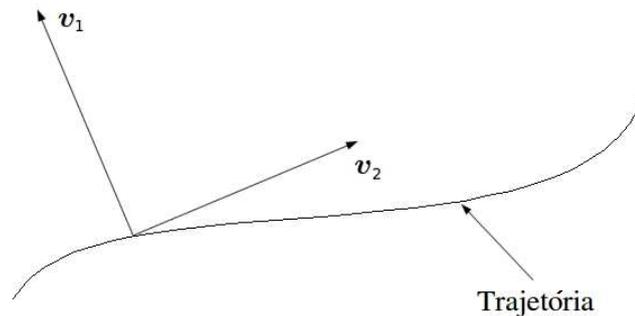


Figura 2.11: Uma base ortonormal para um caso $N = 2$. Os vetores \mathbf{v}_1 e \mathbf{v}_2 irão ser evoluídos a partir das equações lineares do movimento.

Conforme as equações linearizadas do movimento evoluem os N vetores das N bases ortonormais, estes vetores divergem em magnitude e outro problema aparece, agora relacionado as suas orientações. Em um sistema caótico, cada vetor tende a “cair” dentro da direção de mais rápido crescimento. Devido a precisão finita do cálculo computacional, o colapso em uma direção comum faz com que as orientações dos vetores que formam as bases ortonormais tornem-se indistinguíveis. Contudo, estes dois problemas podem ser superados com a utilização do processo de reortonormalização de Gram-Schmidt (GSR), executado sobre um conjunto de vetores.

Quando as equações linearizadas atuam sobre um conjunto inicial de vetores ortonormais, elas produzem um novo conjunto $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_N\}$. Neste momento, entra o GSR, que

fornece o seguinte conjunto novamente ortonormal a partir dos vetores antigos:

$$\begin{aligned}
\mathbf{v}'_1 &= \frac{\mathbf{v}_1}{|\mathbf{v}_1|} \\
\mathbf{v}'_2 &= \frac{\mathbf{v}_2 - (\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{v}'_1)\mathbf{v}'_1}{|\mathbf{v}_2 - (\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{v}'_1)\mathbf{v}'_1|} \\
&\vdots \\
\mathbf{v}'_N &= \frac{\mathbf{v}_N - (\mathbf{v}_N \cdot \mathbf{v}'_{N-1})\mathbf{v}'_{N-1} - \cdots - (\mathbf{v}_N \cdot \mathbf{v}'_1)\mathbf{v}'_1}{|\mathbf{v}_N - (\mathbf{v}_N \cdot \mathbf{v}'_{N-1})\mathbf{v}'_{N-1} - \cdots - (\mathbf{v}_N \cdot \mathbf{v}'_1)\mathbf{v}'_1|}
\end{aligned} \tag{2.44}$$

A frequência de renormalização não é importante, desde que não ocorra divergência nem na magnitude nem orientação, excedendo a limitação computacional.

A GSR jamais afeta a direção do primeiro vetor em um sistema. Além disso, este vetor ainda tende a procurar a direção de maior crescimento no espaço tangente (componentes em outras direções estão crescendo menos ou até encolhendo). Já o segundo vetor, tem sua componente ao longo da direção do primeiro removida e é então normalizado. Os vetores renormalizados \mathbf{v}'_1 e \mathbf{v}'_2 , expressam o mesmo subespaço bidimensional que \mathbf{v}_1 e \mathbf{v}_2 . Apesar das repetidas substituições de vetores, o espaço que estes novos vetores definem sempre procura o subespaço bidimensional que tem o mais rápido crescimento. Assim, a área definida por eles é dada por $2^{(\lambda_1 + \lambda_2)t}$. O tamanho do vetor \mathbf{v}_1 é proporcional a $2^{\lambda_1 t}$, tal que monitorando seu tamanho e a área que ele define com \mathbf{v}_2 , é possível determinar ambos os expoentes. Na prática, como \mathbf{v}'_1 e \mathbf{v}'_2 são ortogonais, podemos determinar λ_2 diretamente do monitoramento do crescimento médio da projeção de \mathbf{v}_2 sobre \mathbf{v}'_2 . De uma forma geral, a projeção dos vetores envolvidos sobre a nova base ortonormal, corretamente atualiza a taxa de crescimento de cada dos k eixos principais, fornecendo estimativas para o Espectro de Lyapunov. Este processo, contudo, permite a integração por quanto tempo for necessário para sua convergência dos expoentes, impedindo qualquer divergência.

Descritos os conceitos necessários para o estudo da dinâmica do sistema utilizado como elemento do reservatório, agora serão apresentados alguns modelos utilizados na descrição dos problemas onde um sistema de interesse interage com um ambiente externo. Será primeiramente feita a apresentação do Movimento Browniano, primeiro modelo a considerar tais efeitos. Posteriormente, serão apresentados os casos onde o ambiente é modelado por sistemas cuja dinâmica é conhecida.

Equação de Langevin

Quando considera-se os efeitos da vizinhança sobre um sistema físico de interesse, a tentativa de analisar separadamente o comportamento de cada elemento que constitui o meio externo torna-se um problema físico de difícil solução.

Abaixo serão descritos dois modelos onde é possível descrever a ação do meio sobre o sistema de interesse: o Movimento Browniano e a dedução da Equação Generalizada de Langevin.

3.1 O Movimento Browniano

Uma dificuldade na descrição de um sistema físico, quando se leva em conta o efeito de sua vizinhança, é que muitas vezes o ambiente externo é complicado de ser modelado e impede uma solução para o problema. Porém, existem alguns exemplos onde é possível incluir na dinâmica do sistema os efeitos do ambiente com o qual ele interage. Neste contexto, um trabalho pioneiro foi sobre o movimento Browniano [1], observado pelo biólogo Robert Brown em 1827, quando ele trabalhava com pequenas partículas de pólen que flutuavam sobre a água, e posteriormente estudado por Einstein [2]. O movimento Browniano pode servir como um protótipo, cuja análise fornece informações sobre os mecanismos responsáveis pela existência de flutuações e dissipação da energia.

Para descrever o movimento Browniano unidimensional, considera-se uma partícula de massa m , posição do centro de massa $x(t)$ e velocidade $dx(t)/dt$. Quando ela está imersa em um líquido a uma temperatura absoluta T , ocorre o aparecimento sobre a partícula de

uma força de caráter aleatório, devido ao seu impacto com as moléculas do líquido, e de uma força viscosa proporcional a sua velocidade, a qual atua como um termo de atrito. Assim, a equação para o movimento da partícula torna-se [46]:

$$m \frac{dv}{dt} = -\alpha v + F(t). \quad (3.1)$$

O termo αv é a força viscosa, onde α é uma constante, e $F(t)$ a força de caráter aleatório mencionada anteriormente. $F(t)$ possui as propriedades [46]:

$$\langle F(t) \rangle = 0 \quad \text{e} \quad \langle F(t)F(t') \rangle = B\delta(t - t'), \quad (3.2)$$

o que indica que força média causada pelas moléculas é nula e seus impactos com o sistema independentes. Nestes casos, a média é considerada sobre um ensemble de sistemas. Quando respeitadas as condições (3.2), a Eq. (3.1) é conhecida como equação de Langevin.

Uma forma de reescrever a Eq. (3.1) é dividir ambos os membros por m ,

$$\frac{dv}{dt} = -\gamma v + \xi(t), \quad (3.3)$$

definindo $\gamma = \alpha/m$ e $\xi(t) = F(t)/m$. $\xi(t)$ possui as mesmas propriedades de $F(t)$:

$$\langle \xi(t) \rangle = 0 \quad \text{e} \quad \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \Gamma\delta(t - t'), \quad (3.4)$$

porém $\Gamma = B/m^2$.

Uma solução para a Eq. (3.3) é apresentada na Ref. [46], a qual é abaixo descrita. Considerando-se uma solução genérica para a Eq. (3.3),

$$v(t) = u(t)e^{-\gamma t}, \quad (3.5)$$

determina-se $u(t)$ substituindo (3.5) na Eq. (3.3). Isto fornece uma equação diferencial para a função $u(t)$ dada por

$$\frac{du}{dt} = e^{\gamma t}\xi(t), \quad (3.6)$$

que pode ser facilmente resolvida. A solução da Eq. (3.6) é

$$u(t) = u(0) + \int_0^t e^{\gamma t'}\xi(t')dt', \quad (3.7)$$

que quando derivada em relação ao tempo fornece a velocidade da partícula,

$$v(t) = v(0)e^{-\gamma t} + e^{-\gamma t} \int_0^t e^{\gamma t'} \xi(t') dt'. \quad (3.8)$$

$v(0)$ é a velocidade da partícula em $t = 0$. As propriedades do ruído permitem determinar a velocidade média da partícula e sua variância, que são dadas por

$$\langle v \rangle = v(0)e^{-\gamma t} \quad (3.9)$$

e

$$\langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2 = \frac{\Gamma}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}), \quad (3.10)$$

onde a média é obtida em um ensemble de sistemas.

A partir das Eqs. (3.9) e (3.10), obtem-se a velocidade quadrática média da partícula Browniana quando ela atinge um estado de equilíbrio, ou seja, quanto $t \rightarrow \infty$. Com a velocidade quadrática média no equilíbrio, é possível calcular sua energia cinética média, que pode ser associada à temperatura através da teoria cinética dos gases [47]. Assim,

$$\frac{1}{2}m \langle v^2 \rangle = \frac{1}{2}k_B T, \quad (3.11)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta. Lembrando que $B = \Gamma m^2$ e que $\alpha = \gamma m$, se estabelece a relação entre B e T ,

$$B = 2\alpha k_B T. \quad (3.12)$$

Da mesma forma que procedemos para obter a velocidade quadrática média e sua variância, obtemos o deslocamento quadrático médio e a variância na posição,

$$x = x(0) + \int_0^t v(t') dt' \quad (3.13)$$

e

$$\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{\Gamma}{\gamma^2} \left\{ t - \frac{2}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) \right\}. \quad (3.14)$$

Diferentemente do caso da velocidade, para tempos longos, o termo dominante agora é o

primeiro, tornando o desvio quadrático médio proporcional a t , isto é,

$$\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = Dt, \quad (3.15)$$

onde $D = \Gamma/\gamma^2 = B/\alpha^2$ é o coeficiente de difusão, que está relacionado à temperatura através da equação

$$D = \frac{2k_B T}{\alpha}. \quad (3.16)$$

Esta relação é conhecida como relação de Einstein-Smoluchowski [46].

A partícula recebe energia do reservatório devido ao impacto aleatório das moléculas do líquido, porém, devido à força de atrito viscosa, sua energia cinética é alterada novamente, transferindo energia novamente para o reservatório. Isto quer dizer que a energia transferida pelo reservatório para a partícula, é igual a variação na sua energia cinética mais a energia dissipada devido à viscosidade do líquido. Para descrever isso matematicamente, multiplica-se ambos os membros da Eq. (3.1) por v e usa-se a seguinte relação:

$$v \frac{dv}{dt} = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} v^2, \quad (3.17)$$

de forma que

$$\frac{m}{2} \frac{d}{dt} v^2 = -\alpha v^2 + vF(t), \quad (3.18)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{m}{2} v^2 \right) + \alpha v^2 = vF(t), \quad (3.19)$$

$$\frac{dE_c}{dt} + vF_{atrito} = vF(t), \quad (3.20)$$

onde $F_{atrito} = \alpha v$ e $mv^2/2 = E_c$ é sua energia cinética. Calculando a média da Eq. (3.20),

$$\frac{dE_c}{dt} + P_{dis} = P, \quad (3.21)$$

temos que a taxa de variação da sua energia cinética mais a taxa de energia dissipada pela força viscosa, é igual a taxa de energia fornecida para a partícula [46].

Quando não ocorre mais variação na energia cinética da partícula, a energia fornecida pelo reservatório é igual a energia dissipada pela força viscosa. Este é justamente o que ocorre no estado estacionário, quando sua energia cinética média é igual a $k_B T/2$. Se a energia cinética média inicial for maior do que seu valor no equilíbrio, esta energia

excedente será absorvida pelo ambiente. Para observar isso com mais detalhes, calcula-se a energia do sistema, que é apenas sua energia cinética,

$$E = \frac{1}{2}mv^2. \quad (3.22)$$

Tirando a média e utilizando a velocidade quadrática média da partícula, juntamente com as relações entre B e a temperatura do líquido, obtém-se

$$\langle E \rangle = \frac{k_B T}{2} (1 - e^{-2\gamma t}) + \frac{1}{2}mv(0)^2 e^{-2\gamma t}, \quad (3.23)$$

que mostra que, para t grande, em média, independente da energia inicial, o sistema termaliza em $\langle E \rangle = k_B T/2$.

3.2 Equação Generalizada de Langevin

Conforme a Sec. 3.1, a Equação de Langevin pode ser usada como base para o estudo teórico do movimento Browniano [46]. No entanto, apesar do sucesso na descrição de problemas clássicos envolvendo dissipação, em especial a tempos longos, ela não permite o estudo de processos dissipativos quando efeitos quânticos tornam-se relevantes. Isto se deve ao fato de a Equação de Langevin, fornecida pelas Eqs. (3.1) e (3.2), não estar associada a uma função Hamiltoniana, a qual pode ser generalizada para o caso quântico, permitindo a utilização dos métodos de quantização.

O modelo Caldeira-Leggett [4] propõe uma solução para este problema, tornando possível a descrição dos processos dissipativos para sistemas quânticos. Para tal, ele considera o Hamiltoniano para o conjunto “sistema mais ambiente mais interação” [7]:

$$\begin{aligned} H &= H_s(\mathbf{Q}, \mathbf{P}) + \sum_{\nu} \left(\frac{\mathbf{p}_{\nu}^2}{2m_{\nu}} + \frac{m_{\nu}\omega_{\nu}^2 \mathbf{q}_{\nu}^2}{2} \right) - \lambda \mathbf{Q} \cdot \mathbf{\Gamma}(\mathbf{q}) \\ &= H_s(\mathbf{Q}, \mathbf{P}) + H_b(\mathbf{q}, \mathbf{p}) - \lambda \mathbf{Q} \cdot \mathbf{\Gamma}(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (3.24)$$

onde $(\mathbf{Q}, \mathbf{P}) = \{Q_i, P_i\}$ é um conjunto de coordenadas e seus momentos conjugados e $H_s(\mathbf{Q}, \mathbf{P})$ é o Hamiltoniano do sistema na ausência do banho térmico. O ν -ésimo oscilador do banho ($\nu = 1, 2, 3, \dots, N$) tem coordenada q_{ν} , momento conjugado p_{ν} , frequência ω_{ν} e massa m_{ν} . O acoplamento do banho térmico ao sistema é linear nas variáveis do sistema, porém envolve uma função analítica mais geral para as variáveis do banho, dada por $\mathbf{\Gamma}(\mathbf{q})$. O parâmetro de acoplamento λ é introduzido convenientemente, como uma forma de controlar o acoplamento sistema-banho térmico. Frequentemente considera-se o caso

de um grau de liberdade para os elementos do banho.

Embora o modelo Caldeira-Leggett tenha sido introduzido em um contexto quântico, ele pode ser explorado classicamente. Para isso, a partir da Hamiltoniana (3.24), obtemos a equação do movimento para as variáveis do sistema,

$$\dot{Q} = \frac{\partial H_s}{\partial P} = P \quad (3.25a)$$

$$\dot{P} = -\frac{\partial H_s}{\partial Q} + \lambda\Gamma(\mathbf{q}), \quad (3.25b)$$

onde uma massa unitária é escolhida para a partícula de interesse. As equações do movimento para as variáveis do banho são:

$$\dot{q}_\nu = \frac{p_\nu}{m_\nu} \quad (3.26a)$$

$$\dot{p}_\nu = -m_\nu\omega_\nu^2 q_\nu + \lambda Q\Gamma_\nu(\mathbf{q}), \quad (3.26b)$$

onde

$$\Gamma_\nu(\mathbf{q}) \equiv \frac{d\Gamma(\mathbf{q})}{dq_\nu}. \quad (3.27)$$

Desta forma, utilizando as Eqs. (3.25) e (3.26), os passos descritos no Apêndice A e um acoplamento bilinear, o qual implica

$$\Gamma(\mathbf{q}) = \sum_\nu \Gamma_\nu q_\nu, \quad (3.28)$$

é possível obter a seguinte equação para o movimento do sistema:

$$\dot{P}(t) + \frac{\partial H_s^{(m)}}{\partial Q} + \lambda^2 \int_0^t d\tau K(t-\tau)P(\tau) = \lambda F(t), \quad (3.29)$$

onde o núcleo de memória dissipativo é dado por

$$K(t-\tau) = \sum_\nu \frac{\Gamma_\nu^2}{m_\nu\omega_\nu^2} \cos[\omega_\nu(t-\tau)], \quad (3.30)$$

a função da força tem a forma

$$F(t) = \sum_\nu \Gamma_\nu \left\{ \left[q_\nu(0) - \frac{\lambda\Gamma_\nu}{m_\nu\omega_\nu^2} Q(0) \right] \cos(\omega_\nu t) + \frac{p_\nu(0)}{m_\nu\omega_\nu} \sin(\omega_\nu t) \right\}, \quad (3.31)$$

e o “Hamiltoniano modificado” é introduzido como [7]

$$H_S^{(m)} \equiv H_S(Q, P) - \lambda^2 \sum_{\nu} \frac{\Gamma_{\nu}^2}{2m_{\nu}\omega_{\nu}^2} Q^2. \quad (3.32)$$

Observa-se que a Eq. (3.29) depende das variáveis do banho somente nas condições iniciais na $F(t)$.

A Eq. (3.29) tem a forma da equação generalizada de Langevin

$$\ddot{\mathbf{Q}}(t) + \mathbf{F}' + \int_0^t d\tau K(t - \tau) \dot{\mathbf{Q}}(t) = \mathbf{F}(t). \quad (3.33)$$

onde \mathbf{F}' é uma força devido a ação de um potencial externo mais um termo de renormalização, $K(t - \tau)$ o núcleo de memória dissipativo e $\mathbf{F}(t)$ a força flutuante.

Para completar a correspondência, deve-se dar uma interpretação estocástica para a função da força e sua função de autocorrelação deve ser relacionada ao núcleo de memória dissipativo.

Como o estado inicial do banho é incerto e em geral determinado somente via uma função distribuição, $F(t)$ é, desta forma, uma soma de um grande (infinito) número de variáveis aleatórias independentes. Se o estado inicial do banho é um estado de equilíbrio, então a distribuição de energia de cada um dos osciladores do banho é a mesma, conseqüentemente, $F(t)$ é uma Gaussiana. O valor médio da Gaussiana resultante é determinado pela forma particular do equilíbrio do banho em $t = 0$. Em geral, duas situações físicas podem aparecer. Primeiro, o banho alcançou o equilíbrio em $t = 0$ na ausência do sistema de interesse, o qual é introduzido neste momento. A função distribuição para o banho então é:

$$P[\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0)] = Z^{-1} e^{-H_B/kT}, \quad (3.34)$$

onde Z é a função partição [48] do banho e H_B é dado pela Eq. (3.24).

Calcula-se agora o valor médio de $F(t)$ utilizando-se as equações do ensemble canônico (Apêndice A), obtendo-se como resultado

$$\langle F(t) \rangle = -\lambda \sum_{\nu} \frac{\Gamma_{\nu}^2}{m_{\nu}\omega_{\nu}^2} Q(0) \cos(\omega_{\nu}t) \quad (3.35)$$

$$\langle F(t) \rangle = -\lambda K(t) Q(0), \quad (3.36)$$

que não concorda com a Equação de Langevin.

A segunda possibilidade é considerar um banho equilibrado em $t = 0$ na presença do sistema. Neste caso a distribuição apropriada de estados iniciais é governada pelo Hamiltoniano do banho modificado:

$$P[\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0)] = Z^{-1} e^{-H_B^{(m)}/kT}, \quad (3.37)$$

onde

$$H_B^{(m)} = \sum_{\nu} \left[\frac{p_{\nu}^2}{2m_{\nu}} + \frac{m_{\nu}\omega_{\nu}^2}{2} \left(q_{\nu} - \lambda \frac{\Gamma_{\nu} Q}{m_{\nu}\omega_{\nu}^2} \right)^2 \right]. \quad (3.38)$$

Com esta distribuição, as flutuações de $F(t)$ são centradas em zero. Esta última escolha da distribuição é consistente com a ideia usual feita em tratamentos fenomenológicos da equação de Langevin.

Com a Hamiltoniana modificada, mostra-se que (ver Apêndice A)

$$\langle F(t) \rangle = 0, \quad (3.39)$$

O cálculo da função de correlação conclui a correspondência da Eq. (3.29) com a Equação de Langevin. Seu cálculo é realizado considerando-se

$$\langle F(t)F(\tau) \rangle = \int F(t)F(\tau)P[\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0)]d\mathbf{q}(0)d\mathbf{p}(0). \quad (3.40)$$

Como resultado, obtemos (ver Apêndice A):

$$\langle F(t)F(\tau) \rangle = kT \sum_{\nu} \frac{\Gamma_{\nu}^2}{m_{\nu}\omega_{\nu}^2} \cos[\omega_{\nu}(t - \tau)]. \quad (3.41)$$

$$\langle F(t)F(\tau) \rangle = kTK(t - \tau), \quad (3.42)$$

que agora completa a derivação da equação de Langevin. Este resultado é exato para o acoplamento bilinear, embora independente do valor de λ .

Para um ambiente constituído de infinitos osciladores harmônicos, a questão da descrição de processos quânticos dissipativos pode agora ser realizada, uma vez que tal modelo concorda com a Equação de Langevin e possui um Hamiltoniano associado.

Embora a Eq. (3.24) pareça apenas uma generalização da Eq. (3.1), algumas diferenças podem ser consideradas e discutidas. Na descrição do movimento Browniano via Equação de Langevin, toda a informação a respeito da influência do ambiente na dinâmica do

sistema está contida em uma força aleatória a qual não conhecemos, apenas podemos descrever suas propriedades, e em uma força dissipativa igual ao produto da velocidade do sistema por uma constante. Estas forças representam os efeitos das colisões do sistema com as partículas do meio e estão relacionadas via o teorema flutuação-dissipação [49]. Como uma consequência destes impactos aleatórios das moléculas do fluido com o sistema, o sistema transfere energia para o reservatório, a qual é então dissipada devido à viscosidade do fluido.

Na Equação Generalizada de Langevin, são os osciladores compondo o ambiente externo que produzem as forças estocásticas, Eq. (3.31), que por sua vez induzem os processos de flutuação e dissipação. Neste caso, a integral do núcleo de memória dissipativo, Eq. (3.30), é quem incorpora a dissipação na equação de movimento do sistema. Porém, quando $N \rightarrow \infty$, a integral recai em um termo dissipativo igual aquele da Equação de Langevin, automaticamente fornecendo, em termos das variáveis do banho, a constante relacionada à dissipação. Este limite faz com que o banho apresente uma distribuição contínua de frequências, além de descrever as trocas de energia entre sistema e ambiente como resultado das muitas colisões com os osciladores do banho.

Porém, os modelos apresentam uma semelhança, que está na distribuição das energias de equilíbrio para o sistema e para o banho. A tempos longos, tanto a Equação de Langevin, quanto a Equação Generalizada de Langevin quando $N \rightarrow \infty$, apresentam uma distribuição do tipo Boltzmann [7, 50]. Isto indica a ocorrência de um fluxo irreversível de energia do sistema para o reservatório devido à interação entre ambos [14].

Mas apesar do sucesso da Equação Generalizada de Langevin na descrição dos efeitos do ambiente sobre a dinâmica do sistema, nem sempre ela pode ser aplicada. Em muitos contextos, em particular para pequenas escalas, o ambiente externo é pequeno e não justifica um reservatório constituído de infinitos osciladores. Desta forma, é conveniente considerá-lo como sendo composto de um número N finito de elementos. A mudança no valor de N produz uma alteração na dimensionalidade do sistema dinâmico que descreve o problema, além de gerar algumas particularidades na dinâmica do sistema [16–19].

A dinâmica microscópica que ocorre à medida que o número de graus de liberdade de um sistema aumenta não é simples, de forma que sua relação com os efeitos macroscópicos é muito complicada. Quando o número de osciladores é pequeno, seu espectro de frequências não é uma função suave, mas apresenta grandes variações, uma vez que muitas frequências não estão presentes no intervalo de interesse. Com isso, o sistema é então fortemente acoplado a alguns modos especiais do ambiente, que devido a sucessivas colisões, acabam caracterizando a sua dinâmica.

Estas sucessivas colisões com os poucos modos do banho, podem induzir um movimento não Markoviano no sistema, aquele para o qual os efeitos de memória estão presentes, o que faz com que sua dinâmica seja diferente daquela descrita pela Equação de Langevin [18]. Devido ao ambiente ser finito, os efeitos dissipativos estão relacionados a um complicado núcleo de memória dissipativa, diferentemente do caso $N \rightarrow \infty$, quando ele é descrito por uma função Delta de Dirac. Isto indica que a dinâmica do sistema sempre apresenta um termo de memória, isto é, que cada interação do sistema com o ambiente depende de sua história pregressa.

Este movimento não Markoviano, acaba gerando implicações na distribuição de equilíbrio e na forma como a energia é absorvida pelo banho. Conforme discutido anteriormente, tanto a Equação de Langevin quanto a Equação Generalizada de Langevin no limite $N \rightarrow \infty$, no equilíbrio, produzem distribuições de energia do tipo Boltzmann, tanto para o sistema como para o banho. No entanto, a termalização completa de sistemas finitos requer algumas relações especiais entre as frequências e massa do sistema e as frequências dos osciladores [20, 21]. Ou seja, uma termalização completa para ambientes finitos, somente ocorre quando a faixa de frequências dos osciladores e do sistema é limitada e contida dentro de um intervalo específico [20, 21]. Do contrário, isto não ocorre.

Além de afetar a distribuição de energia do equilíbrio do sistema e do banho, a ocorrência de fluxo irreversível de energia do sistema para o reservatório também acaba sujeita a condições especiais [24, 25], passando a depender do tamanho do banho [19]. O que se observa, é que para pequenos valores de N , $1 \lesssim N \lesssim 10$, embora a energia do sistema sofra muitas oscilações, ela não é completamente absorvida pelo reservatório, sofrendo apenas uma pequena variação [18, 19]. À medida que o número de osciladores aumenta, $10 \lesssim N \lesssim 60$, ocorre uma absorção acentuada de energia pelo reservatório, com o sistema perdendo quase toda sua energia [18, 19]. Uma característica deste processo é que tal troca não é exponencial, mas obedece uma lei de potência, uma das características de banhos finitos [18]. À medida que o número de osciladores do reservatório cresce, $N \simeq 500$, o movimento Markoviano é recuperado e a queda exponencial volta a ocorrer [18, 19].

Assim, caracterizamos e discutimos alguns modelos utilizados na descrição de sistemas interagindo com sua vizinhança. Porém, até agora, nenhuma observação foi feita quanto à dinâmica dos constituintes utilizados para descrever o meio. A utilização de sistemas que apresentam outro tipo de movimento, como por exemplo movimento caótico, também tem sido explorada com o intuito de descrever ambientes com o qual o sistema interage. Com isto, é possível observar a importância do caos presente no reservatório sob a dinâmica do

sistema. Este será o assunto do próximo capítulo.

Banhos Caóticos

A Equação de Langevin descreve o comportamento irregular de pequenas partículas de pólen sobre a superfície de um líquido. A origem desta irregularidade está associada às inúmeras colisões que as partículas sofrem com as moléculas do fluido. Uma vez que a interação com os constituintes do líquido modifica muito o estado das partículas, a descrição deste movimento passa a ser feita utilizando-se médias, que podem ser no tempo ou no ensemble. No entanto, para que estas médias sejam válidas, precisa-se considerar que o intervalo de tempo entre uma observação e outra seja muito maior do que o tempo que as partículas levam para perder a memória de fatos anteriores, tornando assim cada observação uma medida independente. É justamente este fato que caracteriza o movimento Browniano como um processo estocástico Markoviano [51].

A mesma descrição do parágrafo anterior também pode ser obtida utilizando a Equação Generalizada de Langevin, desde que considerado o limite em que o número de osciladores no banho tenda ao infinito [7]. Se tal limite não for considerado, uma complicada integral de memória estará presente na Equação Generalizada de Langevin, fazendo com que os dois eventos observados não sejam mais independentes, conseqüentemente passando agora a apresentar um movimento não Markoviano [16–19].

No entanto, o que aconteceria com a dinâmica do sistema se, ao invés de conectá-lo a um banho de osciladores harmônicos, ele fosse conectado a um ambiente que apresente dinâmica caótica?

A descrição de tal problema teve início com o trabalho de Edward Ott sobre invariantes adiabáticos de sistemas ergódicos¹ [52]. Ott mostrou, que para sistemas Hamiltonianos

¹Invariantes adiabáticos são quantidades físicas que apresentam uma variação muito lenta no tempo.

dependentes do tempo e ergódicos, o volume do espaço de fase contido dentro da sua superfície de energia $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ é o único invariante adiabático. Porém, para que isto seja verdade, é necessário que a variação temporal do Hamiltoniano seja muito mais “lenta” que o movimento do sistema. Isto quer dizer, que enquanto o sistema visita várias regiões do espaço de fase, o Hamiltoniano mantém-se aproximadamente constante. Partindo deste princípio, é possível obter a evolução temporal da superfície de energia em termos de seu valor inicial em $t = 0$ [52], o que mostra que ela comporta-se de forma difusiva, dependendo de ambos, da escala de tempo com a qual o Hamiltoniano varia e do tempo de correlação do sistema ergódico [52, 53]. Baseado no movimento Browniano [51], isto sugere que tais sistemas também podem ter sua dinâmica governada por alguma equação do tipo Langevin [54].

Para que se possa comprovar este fato, o problema estudado por Ott precisa ser adaptado, considerando a variação temporal lenta do Hamiltoniano como resultado da evolução de um sistema físico de interesse. No entanto, quando fazemos isso, o resultado de Ott nada mais é do que à descrição de processos de troca de energia entre sistema e ambiente, como ocorre com a Equação Generalizada de Langevin, porém agora, a dinâmica do sistema rápido é livre, podendo ser caótica ou regular.

Quando esta construção é considerada, pode-se tratar o sistema lento como um sistema físico de interesse, enquanto o Hamiltoniano rápido passa a ser pensado como um ambiente externo, ou um banho, que pode apresentar qualquer regime dinâmico. Com esta interpretação para o problema, o fluxo de energia do sistema para o ambiente é visto como um efeito dissipativo, que leva a energia do sistema lento a ser absorvida pela vizinhança rápida. Utilizando esta ideia, Wilkinson foi pioneiro em examinar os efeitos do caos em gerar dissipação, mostrando que ela aumenta drasticamente se a dinâmica do sistema rápido passa de regular para caótica [30]. Ele também mostrou que a origem deste fato está em o movimento caótico gerar sob o sistema lento uma força de atrito proporcional a sua velocidade, que por sua vez, produz o fluxo irreversível de energia entre sistema e reservatório. Unido a isso, esta força de atrito desaparece quando a dinâmica do ambiente é integrável [30], tornando-o menos eficiente. Este resultado tem uma interpretação importante, pois agora sistemas caóticos de baixa dimensionalidade podem representar reservatórios térmicos com o qual um sistema interage e perde energia [30]. Porém, diferente do modelo Caldeira-Leggett, não é necessário um número infinito de osciladores.

Berry e Robbins consideraram o mesmo problema estudado por Wilkinson, porém em mais detalhes [31]. No fundo, o que Berry e Robbins obtiveram foram correções para

o comportamento da energia do sistema rápido quando sua evolução temporal é obtida através da aproximação do volume no espaço de fase como um invariante adiabático. Eles mostraram, que o primeiro termo da correção está relacionado a consideração do volume como uma constante de fato. Isto leva a um potencial renormalizador na energia do sistema, semelhante àquele obtido no modelo Caldeira-Leggett e que acaba aparecendo no Hamiltoniano modificado da Equação Generalizada de Langevin [7]. Se somente este termo for considerado na dinâmica do sistema lento, ele não irá gerar nenhum efeito dissipativo, pois trata-se apenas de um termo renormalizador da sua energia [31]. Como uma segunda correção na energia, aparecem duas forças, uma força dissipativa proporcional a velocidade, e outra força a qual Berry e Robbins chamam de “magnetismo geométrico” [31]. O “magnetismo geométrico” nada mais é do que um termo de força que atua no sistema lento e que é dado pelo produto vetorial da sua velocidade por um campo magnético definido a partir das propriedades do sistema rápido, daí o nome de magnetismo geométrico [31]. Já o termo dissipativo, também chamado atrito determinístico, leva este nome por estar relacionado ao caos determinístico do ambiente. Esta força produz o efeito dissipativo no sistema lento, de tal forma que o resultado de sua ação é o fluxo irreversível de energia do sistema para o ambiente [31], similar à Equação Generalizada de Langevin. Tal resultado nada mais é do que a força de atrito obtida por Wilkinson na descrição da importância do caos em promover os processos dissipativos [30].

O aparecimento da força de atrito determinístico atuando sobre o sistema lento [30, 31], faz com que sua energia seja absorvida pelo sistema rápido, o qual necessariamente precisa ser caótico. O que acontece então com o sistema lento, é que ele acaba “termalizando” com o sistema rápido e atingindo um estado de “equilíbrio estatístico” [35]. No entanto, esta termalização e este estado de equilíbrio estatístico são diferentes do caso do modelo Caldeira-Leggett, onde é possível definir uma temperatura para o banho e para o sistema [34]. Esta diferença tem origem no fato de agora não possuímos um grande número de graus de liberdade, pois temos sistemas caóticos de baixa dimensionalidade, não permitindo a equipartição da energia [35]. Para estes casos, a distribuição a tempos longos depende do modelo utilizado como ambiente caótico, não possuindo uma regra geral [34].

Outra forma de compreender o motivo de sistemas caóticos de baixa dimensionalidade poderem atuar como reservatórios térmicos, está no fato deles apresentarem funções de correlação que vão a zero rapidamente [55]. Assim, o tempo que sistemas caóticos levam para perder sua correlação, desempenha o mesmo papel do tempo necessário para que dois eventos microscópicos distintos no Movimento Browniano sejam independentes [51].

Até o momento, vimos que muitas características apresentadas por sistemas interagindo com banhos caóticos podem também ser encontradas na equação de Langevin ou no modelo Caldeira-Leggett, como por exemplo o comportamento difusivo na energia e a termalização entre ambiente e sistema [30, 35]. Em especial o comportamento difusivo na energia, relacionado ao fluxo de energia do sistema de interesse para o reservatório, leva a entender que os efeitos da dinâmica caótica rápida sobre um sistema lento também podem ser descritos por uma espécie de equação de Langevin. Como esperado, tal equivalência existe e foi apresentada por Carvalho e Aguiar [33, 54]. Para isto, a Hamiltoniana do problema sistema mais banho mais interação é escrita em termos de equações lineares do movimento, as quais acabam por expressar o Hamiltoniano do sistema caótico (um sistema com dois graus de liberdade) como uma soma infinita de osciladores, cada um deles com uma frequência distinta [54] (Mais detalhes sobre esta formulação podem ser encontrados em [33] e [54]). A solução das equações de Hamilton para este novo Hamiltoniano produz como resultado uma força flutuante que atua sobre o sistema, similar àquela encontrada na Equação Generalizada de Langevin, Eq. (3.31), e um termo dissipativo. Isto permitiu estabelecer a correspondência entre o Modelo Caldeira-Leggett e os banhos caóticos de baixa dimensionalidade.

Vamos focar nossa atenção somente no termo dissipativo obtido através deste formalismo, o qual é dado por [33]

$$\frac{\lambda^2}{4\pi} \int_0^\infty S_x(\omega) \left(\int_0^t \sin \omega(t-t') q(t') dt' \right) d\omega \quad (4.1)$$

onde λ é o parâmetro de acoplamento, que foi considerado fraco, $q(t')$ a coordenada de posição do sistema lento, ω a frequência dos osciladores usados para descrever a Hamiltoniana do sistema caótico e $S_x(\omega)$ a densidade espectral destas frequências [33].

A forma deste termo concorda muito bem com o obtido na Equação Generalizada de Langevin, Eq. (3.29), no entanto, aqui ocorre a presença de uma densidade espectral. A densidade espectral pode ser calculada através da seguinte integral [33]:

$$S_x(\omega) = 4\Re \left(\int_0^\infty e^{-i\omega\tau} C_x(\tau) d\tau \right), \quad (4.2)$$

onde

$$C_x(\tau) = \langle x_d(t+\tau)x_d(t) \rangle, \quad (4.3)$$

ou seja, a função de correlação da variável x do sistema caótico antes de ser acoplado ao

sistema lento. A obtenção de (4.3) é possível numericamente e tem o mesmo comportamento para todos os sistemas caóticos Hamiltonianos [55]. Isto é mostrado na Fig. 4.1.

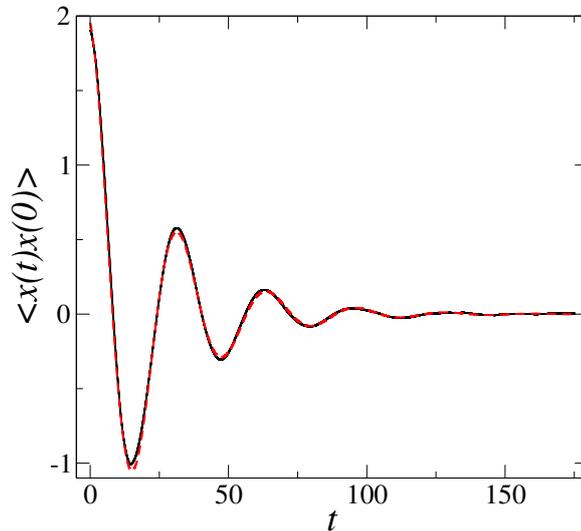


Figura 4.1: Comportamento da função de correlação para um sistema caótico (linha contínua) juntamente com o “fit” fornecido pela Eq. (4.4) (linha vermelha tracejada). Os dados foram obtidos considerando $t = 0$ na Eq. (4.3).

Tal curva é bem ajustada pela função

$$C_x(\tau) = \sigma^2 e^{-\alpha\tau} \cos(\omega_0\tau), \quad (4.4)$$

de forma que é possível calcular a densidade espectral $S_x(\omega)$:

$$S_x(\omega) = 2\alpha\sigma^2 \left(\frac{1}{(\omega + \omega_0)^2 + \alpha^2} + \frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + \alpha^2} \right). \quad (4.5)$$

Infelizmente este resultado não permite calcular a integral (4.2) de forma fechada, para obter então o termo de dissipação. Porém, podemos observar que este termo dissipativo depende do ambiente caótico através dos parâmetros envolvidos na função descrevendo sua correlação [33].

Assim, está apresentada uma descrição dos fenômenos envolvidos quando sistemas lentos interagem com sistemas caóticos rápidos de baixa dimensionalidade. Estes resultados apresentados mostram, de forma conceitual, todos os agentes responsáveis pela promoção dos fenômenos dissipativos, além de trazer sua relação com outros modelos que podem descrever fluxos de energia entre sistema e ambiente, como a Equação de Langevin

e a Equação Generalizada de Langevin.

Outro ponto importante, e que é considerado na descrição de processos dissipativos envolvendo banhos caóticos de baixa dimensionalidade, é o fato de todos os trabalhos descritos acima envolverem médias de ensemble. Como sabemos, isto envolve uma função distribuição de probabilidades. Para o caso de cálculos numéricos, seu cálculo é feito de forma implícita, contudo, quando o objetivo é obter soluções analíticas, a função distribuição precisa ser descrita explicitamente [32, 34].

Se focarmos nos processos dissipativos, por exemplo a descrição do fluxo de energia do sistema para o ambiente, uma solução analítica envolve o cálculo da função distribuição e sua evolução temporal, uma vez que precisaríamos calcular o valor médio da energia durante todo o processo [34]. Uma forma de obter tal função é através da chamada Teoria da Resposta Linear [56], a qual é capaz de calcular de forma aproximada, e até primeira ordem, a função distribuição para problemas envolvendo acoplamento fraco. Na Sec. 4.1 tal processo será descrito, fornecendo assim os mecanismos necessários a sua obtenção.

4.1 A Teoria da Resposta Linear (TRL)

O cálculo de médias envolve a existência de uma função distribuição [48]. A TRL é um método de se obter tais funções e que apresenta seus resultados em termos de funções de correlação de quantidades físicas relevantes ao problema em questão [3]. Ela pode ser aplicada tanto a sistemas clássicos como quânticos [56]. No entanto, aqui apresentaremos apenas sua versão clássica, seguindo os mesmos passos apresentados em [32, 34, 57].

O cálculo de médias, como por exemplo a energia $\langle E_0(t) \rangle$ de um sistema de interesse, envolve uma função distribuição $\rho(Q, P; t)$, cujo valor inicial é $\rho(Q, P; 0)$. Se este sistema estiver isolado, a distribuição é invariante e a igualdade $\rho(Q, P; t) = \rho(Q, P; 0)$ permanece sempre válida. No entanto, a interação deste sistema com um ambiente externo provoca uma mudança no valor da sua energia, fazendo com que a igualdade não seja mais válida. A TRL fornece uma forma de calcular correções de primeira ordem na função distribuição. Assim, para que esta correção linear forneça os termos relevantes as mudanças sofridas pela função distribuição, o acoplamento entre sistema e ambiente deve ser fraco e o sistema não encontre-se longe de seu estado de equilíbrio.

Para isto, consideramos que o acoplamento do sistema com seu ambiente produza uma

perturbação da seguinte forma

$$H_I(Q, P, t) = -A(Q, P)\chi(t) \quad (4.6)$$

no Hamiltoniano $H_0(Q, P)$ do sistema. $A(Q, P)$ é uma função arbitrária da posição e momento do sistema e $\chi(t)$ uma função do tempo.

Uma função de distribuição genérica, segue a equação de Liouville

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = i [L_0 + L_I(t)] \rho(t), \quad (4.7)$$

onde os Operadores de Liouville são dados por

$$iL_0\rho(t) = \left[\sum_{i=1}^N \frac{\partial \rho(t)}{\partial x_i} \frac{\partial H_0}{\partial p_{x_i}} - \frac{\partial \rho(t)}{\partial p_{x_i}} \frac{\partial H_0}{\partial x_i} \right] = \{H_0, \rho(t)\}, \quad (4.8)$$

$$iL_I\rho(t) = \left[\sum_{i=1}^N \frac{\partial \rho(t)}{\partial x_i} \frac{\partial H_I(t)}{\partial p_{x_i}} - \frac{\partial \rho(t)}{\partial p_{x_i}} \frac{\partial H_I(t)}{\partial x_i} \right] = \{H_I, \rho(t)\}, \quad (4.9)$$

com a soma correndo sobre todas as variáveis canônicas. $\{ , \}$ indica os Colchetes de Poisson [37].

A solução da equação diferencial (4.7) possui uma representação integral na forma (ver Apêndice B)

$$\rho(t) = e^{i(t-t_0)L_0} \rho(t_0) + i \int_0^t e^{i(t-s)L_0} L_I(s) \rho(s) ds. \quad (4.10)$$

Neste momento, uma observação deve ser feita sobre o problema para podermos prosseguir. A TRL calcula a função de distribuição quando um sistema passa a sofrer a ação de uma perturbação. No entanto, antes desta perturbação começar a atuar, vamos considerar que o sistema está em equilíbrio inicial, o qual vai ser então perturbado. Esta distribuição inicial chamamos ρ_e e a consideramos invariante por evolução temporal, devido a forma como ela é definida. Assim

$$e^{i(t-t_0)L_0} \rho(t_0) = \rho(t_0) = \rho_e, \quad (4.11)$$

e conseqüentemente

$$\rho(t) = \rho_e + i \int_0^t e^{i(t-s)L_0} L_I(s) \rho(s) ds. \quad (4.12)$$

Como agora temos a função distribuição para o sistema após a ação de uma perturbação, o valor médio de uma variável $B(Q, P)$ do sistema, o qual depende apenas das suas posições e momentos, já pode ser calculado.

$$\langle B(Q, P) \rangle = \int B(Q, P) \rho(P, Q) dQ dP \quad (4.13)$$

$$\begin{aligned} \langle B(Q, P) \rangle &= \int B(Q, P) \rho_e dQ dP \\ &+ i \int \int_0^t B(Q, P) e^{i(t-s)L_0} L_I(s) \rho(s) ds dQ dP \end{aligned} \quad (4.14)$$

Para simplificarmos ainda mais a Eq. (4.14), considera-se uma observação feita já no primeiro parágrafo desta seção, a qual diz que a TRL vale em um limite de acoplamento fraco e próximo do equilíbrio. Isto permite escrever $\rho(Q, P; t)$ em termos de uma expansão em série em torno de t_0

$$\rho(t) = \rho(t_0) + \left. \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} \right|_{t=t_0} (t - t_0) + \dots \quad (4.15)$$

Ao substituírmos a Eq. (4.15) na Eq. (4.12), obtemos

$$\rho(t) = \rho_e + i \int_0^t e^{i(t-s)L_0} L_I(s) \left(\rho(t_0) + \left. \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} \right|_{t=t_0} (s - t_0) + \dots \right) ds, \quad (4.16)$$

a qual pode ser simplificada utilizando-se a Eq. (4.7)

$$\begin{aligned} \rho(t) &= \rho_e + i \int_0^t e^{i(t-s)L_0} L_I(s) \rho(t_0) ds \\ &+ i \int_0^t e^{i(t-s)L_0} i L_I(s) [L_0 + L_I(t_0)] \rho(t_0) (s - t_0) ds. \end{aligned} \quad (4.17)$$

A consideração de um acoplamento fraco permite dizer que a interação também é fraca, uma vez que é justamente no termo de interação que medimos a intensidade do acoplamento. Desta forma, termos não lineares em L_I serão desconsiderados, mantendo somente o termo linear. Com isto, a função distribuição torna-se

$$\rho(Q, P, t) = \rho_e(Q, P) + \int_0^t e^{i(t-s)L_0} i L_I(s) \rho(t_0) ds, \quad (4.18)$$

ou ainda, utilizando a Eq. (4.9)

$$\rho(Q, P, t) = \rho_e(Q, P) + \int_0^t e^{i(t-s)L_0} \{H_I(s), \rho_e(Q, P)\} ds. \quad (4.19)$$

Substituindo a Eq. (4.19) em (4.14), podemos calcular o $\langle B(Q, P) \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle B(Q, P) \rangle &= \langle B(Q, P) \rangle_e \\ &+ \int \int_0^t B(Q, P) e^{i(t-s)L_0} \{H_I(s), \rho_e(Q, P)\} ds dQ dP, \end{aligned} \quad (4.20)$$

o que agora depende apenas da função distribuição antes da perturbação.

Utilizando a forma proposta para $H_I(Q, P, t)$, dada pela Eq. (4.6), a Eq (4.20) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \langle B(Q, P) \rangle &= \langle B(Q, P) \rangle_e \\ &+ \int \int_0^t B(Q, P) e^{i(t-s)L_0} \{-A(Q, P), \rho_e(Q, P)\} \chi(s) ds dQ dP, \end{aligned} \quad (4.21)$$

ou

$$\langle B(Q, P) \rangle = \langle B(Q, P) \rangle_e + \int_0^t \phi(t-s) \chi(s) ds, \quad (4.22)$$

onde

$$\phi_{BA}(t-s) = \int B(Q, P) e^{i(t-s)L_0} \{-A(Q, P), \rho_e(Q, P)\} dQ dP, \quad (4.23)$$

a qual é chamada de Função Resposta da grandeza $B(Q, P)$ devido a perturbação $A(Q, P)$.

$\phi_{BA}(t-s)$ pode ser escrita de uma forma mais compacta (Apêndice B),

$$\phi_{BA}(t-s) = \langle \{A[Q(t), P(t)], B[Q(s), P(s)]\} \rangle_e, \quad (4.24)$$

e finalmente

$$\langle B(Q, P) \rangle(t) = \langle B[Q(t), P(t)] \rangle_e + \int_0^t \phi_{BA}(t-s) \chi(s) ds. \quad (4.25)$$

Isto nos mostra, que para o caso de perturbações fracas, a evolução temporal da média de uma grandeza pode ser escrita como sua média no equilíbrio inicial, mais uma correção que depende da sua função resposta.

Com isto, fechamos a fundamentação teórica desta tese, fornecendo os conceitos básicos utilizados na descrição do problema central, o qual será feito no Cap. 5.

Resultados

Neste capítulo é apresentado o modelo utilizado como base para o desenvolvimento desta tese. Tal modelo está relacionado à utilização de sistemas caóticos de baixa dimensionalidade como reservatórios térmicos, conforme discutido no Cap. 4. O problema consiste de um sistema lento, um oscilador harmônico unidimensional, acoplado a um conjunto de N sistemas caóticos bidimensionais, os quais representam um sistema rápido e desempenham o papel de reservatório térmico para o oscilador. A diferença entre o modelo estudado aqui e os discutidos na fundamentação teórica, é que agora o número de graus de liberdade caóticos do ambiente será maior.

Os principais resultados obtidos por nós utilizando este modelo, envolvem uma solução analítica para os processos de troca de energia entre sistema e ambiente, o que possibilita descrever a relação entre estes efeitos e a estrutura dos sistemas caóticos do banho. No restante deste trabalho chamaremos de dissipação o fluxo de energia do sistema para o reservatório.

A solução analítica, obtida para descrever os efeitos dissipativos sobre a dinâmica do sistema, permite estabelecer uma relação entre o problema de banhos caóticos e a dinâmica não linear, a qual fornece ferramentas para caracterizar o comportamento de sistemas dinâmicos. A união destas duas áreas estabelece uma relação entre os processos dissipativos e os Expoentes de Lyapunov dos constituintes do banho, fechando nossos resultados.

5.1 O Modelo

Apresentaremos aqui o modelo utilizado no desenvolvimento deste trabalho. Com o objetivo de alcançar o disposto anteriormente, nosso ponto de partida é o Hamiltoniano clássico

$$H = H_S + H_B + H_I, \quad (5.1)$$

onde H_S é a Hamiltoniana do Sistema, H_B a da vizinhança ou banho e H_I a de interação.

As Hamiltonianas são descritas por [32]

$$H_S = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2 q^2}{2}, \quad (5.2)$$

$$H_B = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{p_{x_i}^2 + p_{y_i}^2}{2} + \frac{a}{4} (x_i^4 + y_i^4) + \frac{x_i^2 y_i^2}{2} \right\}, \quad (5.3)$$

$$H_I = \sum_{i=1}^N \lambda_N x_i q. \quad (5.4)$$

O sistema, com coordenadas generalizadas (q, p) , é um oscilador harmônico unidimensional (OH) de frequência ω_0 e massa m . O banho, por sua vez, é composto de uma soma finita de osciladores quárticos (OQ) [58], caracterizados por uma massa unitária, coordenadas espaciais $\vec{q}_i = x_i \hat{i} + y_i \hat{j}$ e momento $\vec{p}_i = p_{x_i} \hat{i} + p_{y_i} \hat{j}$. O parâmetro a é responsável por controlar a dinâmica do banho, podendo variar de $0,0$ (completamente caótico) até $1,0$ (integrável). A interação entre sistema e ambiente é descrita por um acoplamento bilinear, cuja intensidade pode ser controlada através de $\lambda_N = \lambda/\sqrt{N}$, ou seja, uma função de λ , uma constante de acoplamento, e N , o número de elementos no banho. Esta forma de escrever a interação permite uma comparação entre resultados obtidos para diferentes tamanhos do reservatório [32]. O sistema como um todo (sistema + ambiente + interação) é conservativo, no entanto, a troca de energia entre sistema e reservatório pode ser representada como um efeito dissipativo do segundo sobre o primeiro.

A frequência do OH, o número de elementos no banho, sua dinâmica, entre outros fatores, afetam a dinâmica do sistema. Porém, antes de verificar tais efeitos, será feita uma caracterização do OQ, principalmente da sua dinâmica, utilizando as ferramentas da dinâmica não linear.

5.2 O Oscilador Quártico (OQ)

Utilizando os fundamentos apresentados no Cap. 2, fazemos agora um estudo da dinâmica do OQ. Para isso, consideremos a Hamiltoniana [58]

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2} + a \frac{(x^4 + y^4)}{4} + \frac{x^2 y^2}{2}, \quad (5.5)$$

a qual representa um elemento do banho térmico responsável pela dissipação.

O comportamento não linear do sistema (5.5) é completamente controlado pelo parâmetro a , de tal forma que ele é integrável para $a = 1, 0$, fortemente caótico para $a = 10^{-3}$ e misto para valores intermediários. Assim, a medida que o parâmetro a varia, sua dinâmica é alterada, podendo passar de integrável para completamente caótico e vice versa.

O motivo da mudança no comportamento dinâmico de (5.5) está relacionado ao fato de a variação do parâmetro de controle mudar o formato do potencial sobre o qual o sistema está sujeito. Para observar isto em mais detalhes, escrevemos a Hamiltoniana (5.5) como

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2} + V_a, \quad (5.6)$$

onde

$$V_a = a \frac{(x^4 + y^4)}{4} + \frac{x^2 y^2}{2}. \quad (5.7)$$

Nas Figs. 5.1(a) - (i), temos gráficos do potencial (5.7) no plano $x - y$ para diversos valores do parâmetro a , o que nos permite observar a mudança no potencial devido a mudança no parâmetro.

Observamos que inicialmente a projeção do potencial quártico no plano $x - y$ é um círculo, Fig. 5.1(a) ($a = 1, 0$), correspondendo a um movimento regular do sistema e confinado em um toros. A medida que a diminui, temos uma distorção na sua projeção, tornado-a cada vez mais próxima do formato de uma estrela, Fig. 5.1(h). Para estes valores de parâmetro, o sistema apresenta movimento misto, sendo caótico ou regular, dependendo das condições iniciais. Por fim, em $a = 0, 0$, temos uma projeção não mais fechada, mas o aparecimento de alguns “canais”, Fig. 5.1(i). Para este valor do parâmetro a o movimento do sistema é totalmente caótico.

Pela Fig. 5.1, torna-se claro a mudança no formato do potencial a medida que mu-

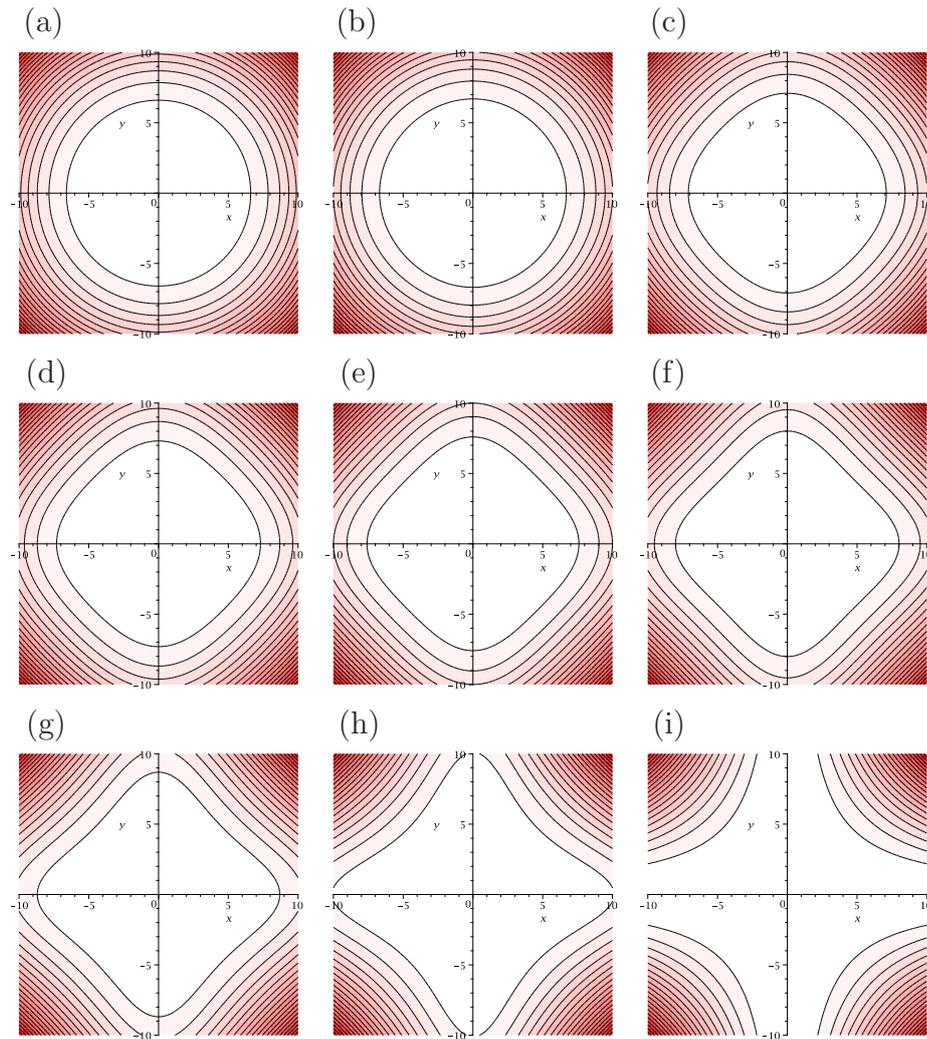


Figura 5.1: Projeções no plano $x - y$ do potencial quártico para (a) $a = 1, 0$, (b) $a = 0, 9$, (c) $0, 6$, (d) $a = 0, 5$ (e) $a = 0, 4$, (f) $a = 0, 3$, (g) $a = 0, 2$, (h) $a = 0, 1$ e (i) $a = 0, 0$. A cor vermelha indica o valor de V_a . Quanto maior o valor do potencial, mais vermelha a região.

damos o parâmetro a . Sendo o mesmo responsável pela dinâmica do sistema, uma partícula sujeita a ação deste potencial acaba também mudando seu comportamento dinâmico. Tal fato pode ser observado na Figs. 5.2 (a) - (i), onde se encontram seções de Poincaré para diferentes valores do parâmetro a .

Para a construção das Figs. 5.2(a) - (i), integrou-se as equações do movimento obtidas do Hamiltoniano (5.5) por um tempo variando de $0, 0$ até 20.000 . Para isto, utilizou-se um integrador Runge-Kutta [59] de passo variável e tolerância de 10^{-15} . Considerou-se uma energia igual a $1, 0$, $y(0) = 0, 0$, $x(0)$ e $p_x(0)$ gerados aleatoriamente com um gerador

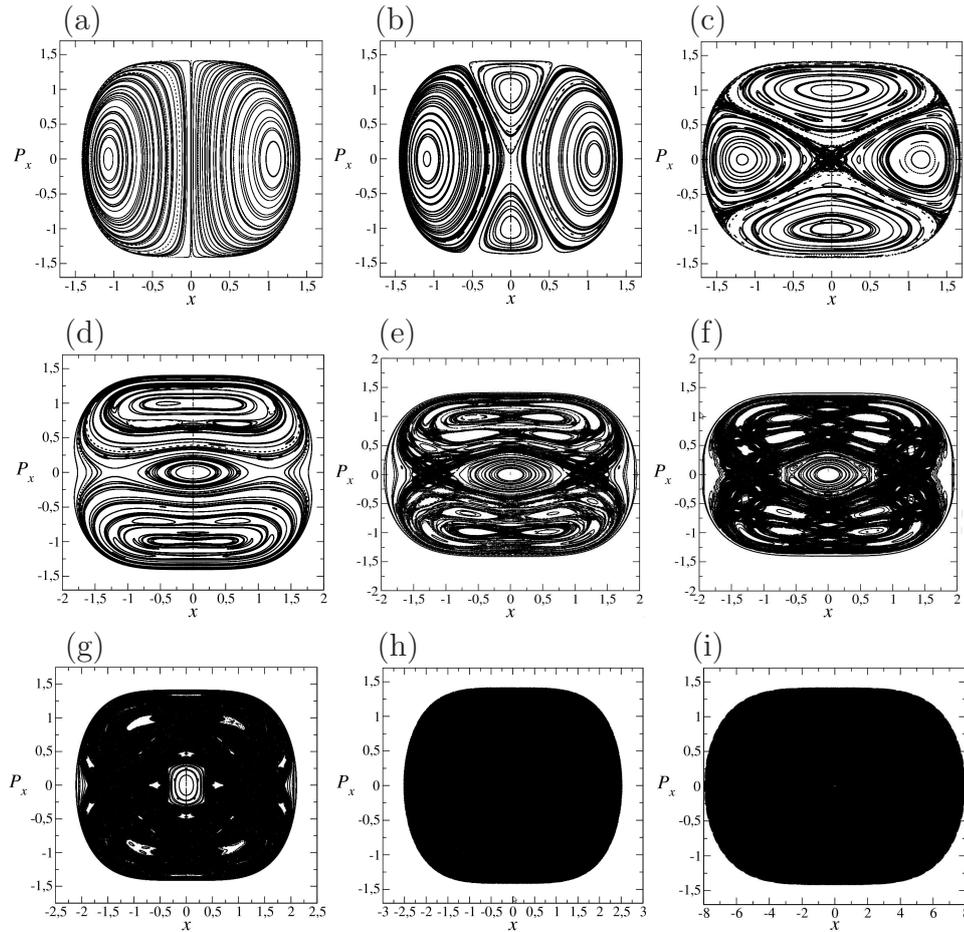


Figura 5.2: Superfícies de seção de Poincaré para (a) $a = 1, 0$, (b) $a = 0, 9$, (c) $0, 4$, (d) $a = 0, 3$ (e) $a = 0, 27$, (f) $a = 0, 25$, (g) $a = 0, 2$, (h) $a = 0, 1$ e (i) $a = 0, 01$.

ran1 [59] e

$$p_y(0) = \sqrt{2 \left\{ E - \left(\frac{p_x^2}{2} + \frac{x^2 y^2}{2} + a \frac{x^4 + y^4}{4} \right) \right\}}. \quad (5.8)$$

Foram utilizadas 250 novas inicializações ou condições iniciais.

A Fig. 5.2 ilustra as seções de Poincaré para diferentes valores do parâmetro a . A Fig. 5.2-(a) mostra que realmente para $a = 1, 0$, o movimento do sistema é totalmente regular e confinado a um toros, independentemente da condição inicial. Quando o parâmetro a vai diminuindo, $a = 0, 9$ por exemplo, ocorre o aparecimento de ilhas e algumas pequenas regiões de movimento caótico, embora ainda pouco perceptíveis. Diminuindo ainda mais o valor de a , observamos o aparecimento de mais e mais regiões caóticas e o desaparecimento das regiões regulares, até tornar-se totalmente caótico em $a = 0, 01$, Figs. 5.2(c) - (i). Tal processo de quebra de estruturas periódicas segue o Teorema KAM descrito no Cap. 2.

Para estudar a dinâmica do sistema dado por (5.5), consideramos apenas a variação

do parâmetro a com um único valor de energia. Se variarmos a energia do sistema, apenas variamos a escala do movimento, não afetando a característica do mesmo. Para observarmos isto de maneira mais formal, pegamos a energia total do sistema:

$$E = \frac{p_x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2} + \frac{a}{4}(x^4 + y^4) + \frac{1}{2}x^2y^2. \quad (5.9)$$

Pela propriedade de reescala, o movimento do sistema para uma energia E , é totalmente semelhante ao movimento do sistema quando sua energia é igual a E_0 , bastando para isto fazer a seguinte transformação de coordenadas [57]:

$$p_i = \left(\frac{E}{E_0}\right)^{1/2} p_i^0$$

$$q_i = \left(\frac{E}{E_0}\right)^{1/4} q_i^0,$$

onde p_i^0 e q_i^0 significam respectivamente os valores dos momentos e coordenadas com energia E_0 , enquanto p_i e q_i os valores de momentos e coordenadas com energia E . Além da energia e do momento, o tempo também pode ser reescalado com a energia

$$t = \left(\frac{E}{E_0}\right)^{-1/2} t_0$$

sendo t_0 e t respectivamente o tempo para a energia E_0 e E .

É interessante observar que com esta propriedade de reescala, um determinado comportamento do sistema pode ser colocado dentro de diferentes intervalos de tempo, aumentando uma espécie de “velocidade relativa” do sistema.

De uma forma geral, podemos resumir o comportamento de (5.5) da seguinte forma:

Parâmetro	Regime
a = 1,0	Totalmente Regular
a = 0,9	Misto
a = 0,6	Misto
a = 0,5	Misto
a = 0,4	Misto
a = 0,3	Misto
a = 0,2	Misto
a = 0,1	Caótico
a = 0,01	Caótico

Na tabela acima, dissemos que quando o parâmetro a tende a zero, a dinâmica do sistema torna-se caótica. No entanto, tal resultado está baseado apenas no observado nas Figs. 5.2(h) e (i). O Espectro de Lyapunov médio como uma função do parâmetro a , mostrado na Fig. 5.3, ajudará a confirmar os resultados da tabela.

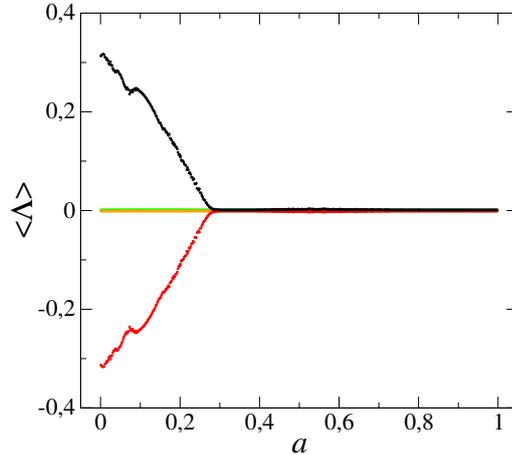


Figura 5.3: Espectro de Lyapunov médio para o sistema (5.5). A média foi realizada sobre $5,0 \times 10^5$ condições iniciais. O tempo de integração foi de 10^6 .

As condições iniciais utilizadas na construção da Fig. 5.3 foram escolhidas aleatoriamente sobre uma superfície de energia $E = 0, 1$, utilizando a parametrização [34]

$$x^2 = \sqrt{\frac{2E}{\cos 2\theta}} \left[\frac{\cos \theta}{\sqrt{1+a}} + \frac{\sin \theta}{\sqrt{1-a}} \right] \sin \xi, \quad (5.10)$$

$$y^2 = \sqrt{\frac{2E}{\cos 2\theta}} \left[\frac{\cos \theta}{\sqrt{1+a}} - \frac{\sin \theta}{\sqrt{1-a}} \right] \sin \xi, \quad (5.11)$$

$$p_x = \sqrt{2E} \cos \varphi \cos \xi, \quad (5.12)$$

$$p_y = \sqrt{2E} \sin \varphi \cos \xi, \quad (5.13)$$

com

$$0 < \theta \leq \theta_0 < \frac{\pi}{4}, \quad (5.14)$$

$$0 \leq \xi \leq \frac{\pi}{2}, \quad (5.15)$$

$$0 \leq \varphi \leq 2\pi, \quad (5.16)$$

$$\tan \theta_0 = \sqrt{\frac{1-a}{1+a}}. \quad (5.17)$$

θ , φ e ξ são três ângulos, os quais são escolhidos aleatoriamente utilizando o gerador aleatório ran1 [59]. É importante ressaltar aqui que esta parametrização será utilizada

no restante desta tese para obter as condições iniciais do OQ. A partir de cada condição inicial, o sistema e suas respectivas equações linearizadas foram evoluídas no tempo através de um integrador numérico Runge-Kutta de quarta ordem e passo fixo [59]. O passo de integração utilizado foi $h = 10^{-3}$ e a energia do sistema foi testada até uma precisão de 10^{-8} . Com isso, foi obtido o Espectro de Lyapunov para cada condição inicial, o que permite assim calcular o valor médio do espectro, que é mostrado na Fig. 5.3.

O que podemos observar, é que a medida que a aproxima-se de zero, o sistema vai tornando-se cada vez mais caótico, uma vez que seu maior Expoente de Lyapunov médio fica cada vez maior. Isto confirma que nesta região, o sistema é caótico. Lembramos aqui que tal afirmação só é possível pois sua dinâmica é definida em uma região finita do espaço de fase e ele possui uma dimensão maior do que dois [36]. Nas regiões indicadas como misto, $a = 0,5$ por exemplo, vemos que o maior Expoente de Lyapunov é aproximadamente zero, $O(10^{-3})$, o que nos leva a concluir que nesta região, ocorre a predominância de regiões regulares. Como esperado, para a tendendo a um, a dinâmica é regular e o expoente de Lyapunov zero, $O(10^{-4})$. Vale a pena comentar aqui, que se mais condições iniciais forem utilizadas ou for utilizado um tempo maior de integração, a ordem de grandeza dos Expoentes de Lyapunov médios pode mudar, uma vez que uma região maior do espaço de fase acabará sendo visitada, suprimindo eventuais efeitos locais.

Para concluir a análise da dinâmica do sistema (5.5), fazemos uma análise da função de correlação da sua variável x . Para isso, calculamos a Eq. (2.40) fazendo $\tau = 0$ e $f(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) = x$. O resultado é apresentado nas Figs. 5.4(a)-(i).

Para a obtenção das Figs 5.4(a)-(i), procedeu-se da seguinte forma. Utilizando a parametrização (5.10) - (5.17), escolhemos as condições iniciais e a partir delas, evoluímos o sistema no tempo como no caso dos Expoentes de Lyapunov. No entanto, para cada condição inicial, passados 10 passos do integrador, o valor do produto $x(0)x(t)$ era armazenado, sendo posteriormente utilizado para calcular a média. O que fazemos, nada mais é do que calcular uma média de ensemble em diferentes valores de tempo, desde $t = 0$ até $t = 300$, Eq.(2.39). A energia foi testada com uma tolerância de 10^{-10} .

O que observamos nas funções de correlação, é que à medida que o parâmetro a vai a zero, as correlações começam a ir a zero no tempo. Isto indica que o sistema apresenta a propriedade de mistura e seu movimento é ergódico [40]. Para valores de a no regime integrável e misto, o que observamos é que as funções de correlação tendem a ser recorrentes, não indo a zero com o tempo.

Assim, fechamos nossa análise do sistema utilizado como elemento do banho. Agora,

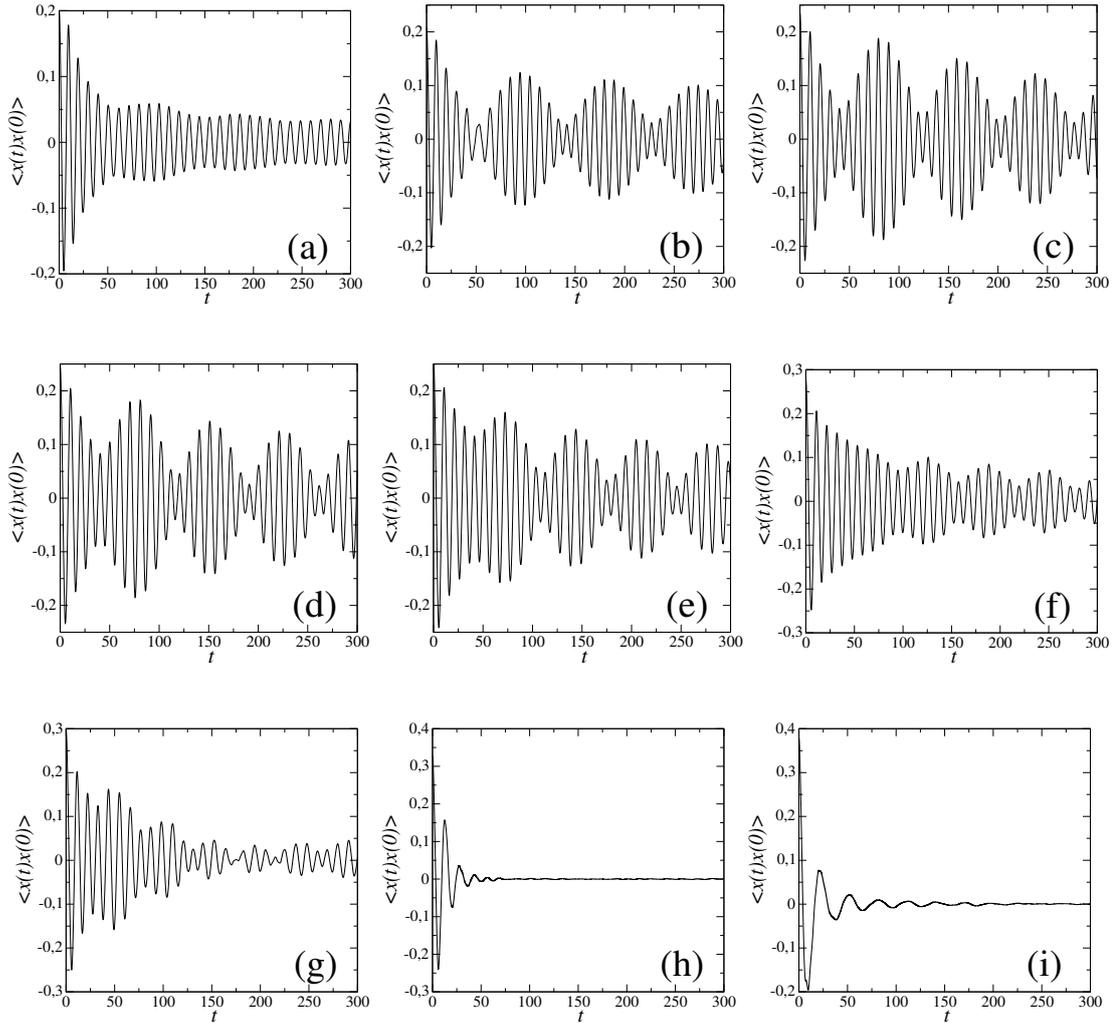


Figura 5.4: Função de correlação da variável x para (a) $a = 0,9999$, (b) $a = 0,9$, (c) $0,6$, (d) $a = 0,5$ (e) $a = 0,4$, (f) $a = 0,3$, (g) $a = 0,2$, (h) $a = 0,1$ e (i) $a = 0,01$. O cálculo da média foi feito utilizando 300.000 condições iniciais e $E = 0,1$.

o que faremos, será discutir os efeitos deste ambiente na dinâmica do oscilador harmônico, utilizando o Hamiltoniano (5.1).

5.3 Efeitos do Banho Caótico

Consideramos agora o problema dado pelo Hamiltoniano (5.1). Para estudar os efeitos do banho sobre a dinâmica do sistema, integramos numericamente as $4N + 2$ equações do movimento, $4N$ para os elementos do banho e 2 para o sistema, e focamos nossa atenção nas variáveis do oscilador harmônico. A integração das equações do movimento segue os mesmos passos utilizados para calcular os resultados apresentados na Fig. 5.4. Os resultados apresentados nesta seção, até a Eq. (5.54), já foram apresentados nas Refs. [32,

57], mas para $N = 100$. Porém, como eles são importantes para o desenvolvimento deste trabalho, iremos reproduzi-los aqui.

Uma vez que o banho caótico é constituído de N OQ's, precisamos definir uma forma de obter as condições iniciais e suas energias em $t = 0$. Para no início não existir nenhuma energia relacionada ao termo de interação, as condições iniciais do OH são $q(0) = 0$ e $p(0) = \sqrt{2mE_0}$. Em todas as simulações usamos $E_0 = 10, 0$, $m = 1$ e $\lambda = 0, 01$. Com esta consideração, a energia inicial total estará dividida entre sistema e ambiente, permitindo assim escolher separadamente a energia de cada elemento do reservatório.

Para a escolha das energias iniciais do banho, usaremos a distribuição Pseudo-Canônica definida em [32]. Esta distribuição fornece para cada elemento individual do banho um valor de energia associado à função distribuição

$$p(E) = \frac{1}{\bar{E}_{OQ}} e^{-E/\bar{E}_{OQ}}, \quad (5.18)$$

a qual está associada à probabilidade de encontrar um elemento do banho com energia entre E e $E + dE$. Aqui, E é a energia do sistema quártico e \bar{E}_{OQ} a energia média por OQ do reservatório. A função (5.18) tem a mesma forma da distribuição canônica, no entanto, recebe um nome diferenciado por estar associada apenas à distribuição inicial das energias dos elementos do banho. Em uma distribuição canônica real, a Eq. (5.18) seria aplicada a energia total do banho, ou seja,

$$p(E) = \frac{1}{E_T} e^{-E/E_T}, \quad (5.19)$$

onde E corresponde agora a energia total distribuída no banho e $\bar{E}_T = N\bar{E}_{OQ}$. Assim, a distribuição canônica real não está associada apenas a um oscilador quártico, mas ao banho como um todo. Como escolhe-se uma função distribuição do tipo canônica mas associada apenas a energia de cada elemento do banho, ela recebe o nome de Pseudo-Canônica. A Fig. (5.5) mostra a função distribuição (5.18) para o caso $\bar{E}_{OQ} = 0, 1$, valor que será utilizado no restante deste trabalho.

A escolha das condições iniciais para as simulações numéricas, limita a validade dos resultados que serão apresentados aqui. Como escolhemos $\lambda = 0, 01$, isto indica que estamos trabalhando em um limite de acoplamento fraco, assim como no caso do modelo Caldeira-Leggett. Além disso, a escolha $\bar{E}_{OQ} = 0, 1$ indica que o banho está frio. Logo, estas são algumas condições que limitam a validade dos resultados que obteremos.

A energia média \bar{E}_{OQ} também está associada com a definição de uma temperatura

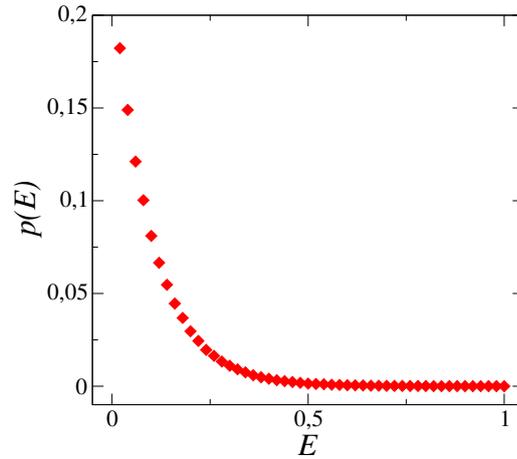


Figura 5.5: Função distribuição (5.18) com $\bar{E}_{OQ} = 0, 1$.

para o banho. A relação entre ambos advém do Teorema da Equipartição da Energia [60], o qual estabelece para um sistema com graus de liberdade x_j e Hamiltoniano H , que no equilíbrio

$$\left\langle x_j \frac{\partial H}{\partial x_j} \right\rangle = \delta_{ij} k_B T, \quad (5.20)$$

onde $\langle \dots \rangle$ indica valor médio, tanto no tempo como no ensemble, δ_{ij} é a Delta de Kronecker e k_B a Constante de Boltzmann. Isto nos permite calcular a contribuição de cada grau de liberdade do problema na energia média de equilíbrio. Em $t = 0$, a distribuição das energias do banho é independente do sistema, devido a ausência de termos de acoplamento. Por este motivo, podemos utilizar o Teorema da Equipartição da Energia e associar uma temperatura ao seu estado inicial. Para isso, consideramos um elemento do banho, cujo Hamiltoniano é dada por (5.5). Utilizando (5.20) obtemos:

$$\left\langle \frac{p_x^2}{2} \right\rangle = \frac{k_B T}{2} \quad (5.21)$$

$$\left\langle \frac{p_y^2}{2} \right\rangle = \frac{k_B T}{2} \quad (5.22)$$

$$\langle x (ax^3 + xy^2) \rangle = \left\langle \frac{ax^4 + x^2y^2}{4} \right\rangle = \frac{k_B T}{4} \quad (5.23)$$

$$\langle y (ay^3 + x^2y) \rangle = \left\langle \frac{ay^4 + x^2y^2}{4} \right\rangle = \frac{k_B T}{4}. \quad (5.24)$$

Somando as Eqs. (5.21) até (5.24), temos a energia média de um elemento, que é igual

a energia média do reservatório

$$\bar{E}_{OQ} = \frac{3}{2}k_B T. \quad (5.25)$$

Desta forma, completa-se a relação entre \bar{E}_{OQ} e a temperatura do banho.

A escolha das energias dos OQ's, utilizando a distribuição Pseudo-Canônica, permite obter as condições iniciais através da parametrização (5.10)-(5.13). Com isto, integra-se as $4N+2$ equações do movimento e pode-se observar as consequências do ambiente na energia $E_0(t)$ do oscilador harmônico. A influência do número N de elementos no banho e o seu regime dinâmico são apresentados na Fig. 5.6(a)-(c). A frequência do oscilador é $\omega_0 = 0,3$ e o eixo temporal é apresentado em múltiplos do período do oscilador, $\tau = 2\pi/\omega_0 = 20,94$.

A Fig. 5.6(a) mostra que, independente do número de elementos no banho, se este estiver em um regime regular, não se observa um fluxo acentuado de energia do sistema para o reservatório. O que acontece neste caso, é uma pequena queda no valor da energia que passa a oscilar em torno de um valor levemente menor que o seu valor inicial. Situação semelhante é observada na Fig. 5.6(b), quando o banho encontra-se em um regime misto. No entanto, para a situação apresentada na Fig. 5.6(c), o cenário é totalmente diferente. O que se observa agora, é que independente do número de elementos, a energia do oscilador é absorvida pelo banho, não mais oscilando em torno de um valor levemente menor, como acontece no caso regular. Para $N = 1$, a energia do oscilador possui grandes flutuações, mas mesmo assim é possível observar seu fluxo para o reservatório. Estas flutuações estão relacionadas ao fato de utilizarmos apenas uma realização. Se uma média de ensemble for utilizada, obtendo centenas de milhares de realizações, estas flutuações desaparecem e torna-se possível observar de forma mais clara o efeito do banho [34].

A medida que N aumenta, a curva $E_0(t)$ torna-se cada vez mais suave. Além disso, percebe-se que quase toda a energia do sistema é absorvida pelo banho. Se compararmos a curva $N = 100$ e $N = 1.000$, vemos que elas diferem bastante no seu comportamento, tal que para $N = 1.000$ as flutuações são menores e seu comportamento muito mais próximo de uma curva exponencial. Outro fator interessante, é que a curva para $N = 1.000$ difere pouco da curva para $N = 2.000$. A diferença entre ambas as simulações está apenas em pequenas flutuações, sendo seu comportamento praticamente o mesmo e bem descrito por uma função exponencial do tipo $E_0(t) = E_0 e^{-\gamma t/\tau}$.

O fato de as curvas $N = 1.000$ e $N = 2.000$ para o regime caótico serem muito parecidas, sugere que a partir de determinado valor de N , a dinâmica do sistema torna-se independente do tamanho do reservatório. Além disso, para valores de N grande, a queda

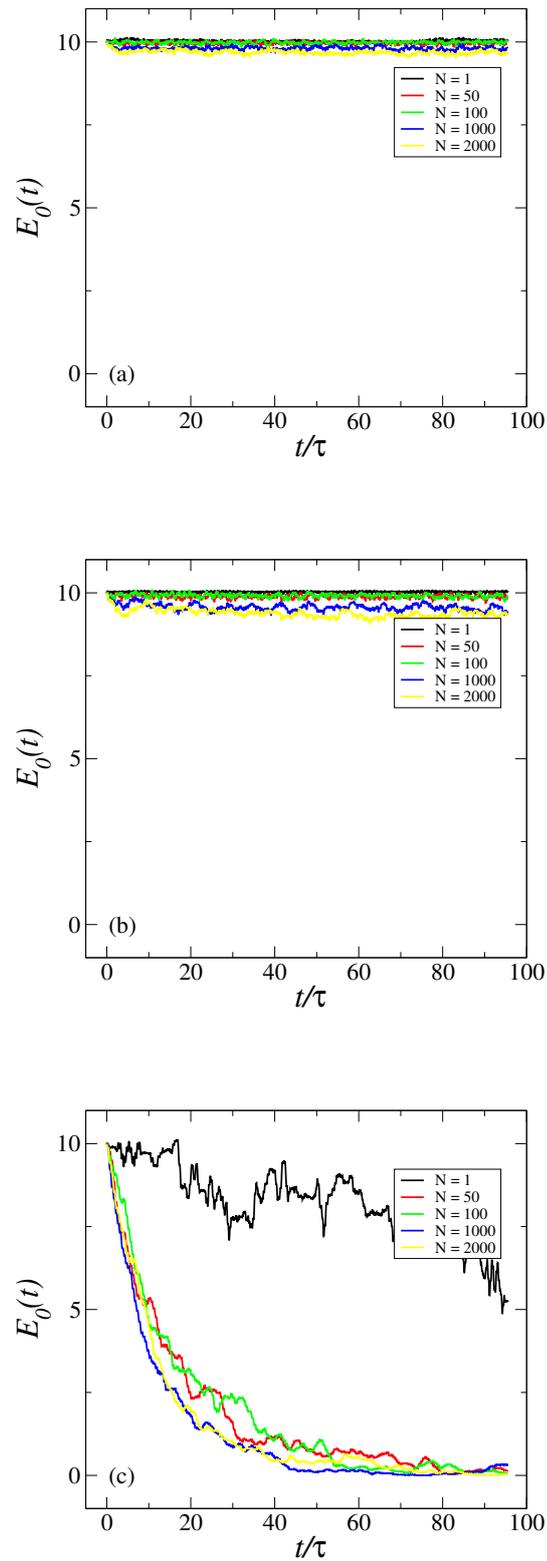


Figura 5.6: Energia do oscilador harmônico como uma função do tempo para $N = 1, 50, 100, 1000$ e 2000 e (a) $a = 0,9999$, (b) $a = 0,5$ (c) $a = 0,01$. Todas as curvas foram obtidas utilizando uma única realização.

de energia pode ser considerada exponencial, conforme mostra a Fig. 5.7.

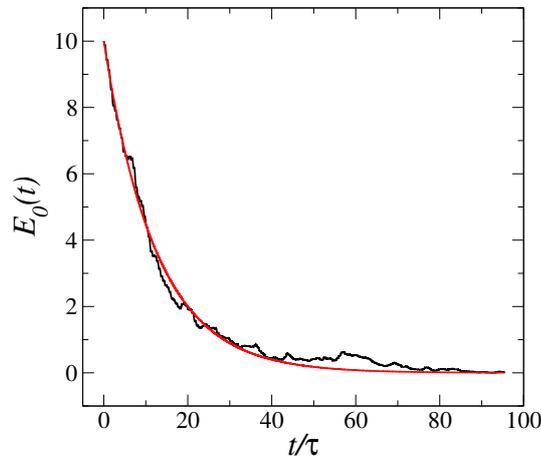


Figura 5.7: Energia do sistema como uma função do tempo para $N = 2.000$. A curva preta é obtida da simulação numérica e a vermelha corresponde à função $E_0(t) = E_0 e^{-\gamma t/\tau}$.

Na Fig. 5.7, utiliza-se $E_0 = 10,0$ e $\gamma = 0,0804394$. O coeficiente de correlação entre os dados numéricos e o “fit” é $0,996068$, sendo que quanto mais próximo de um, melhor a correlação entre as curvas. Embora o resultado numérico apresente flutuações em relação ao “fit”, o valor do coeficiente de correlação comprova o comportamento exponencial da queda da energia do sistema para N grande.

Desta forma, mostramos que para o caso de um banho caótico com N grande, a dinâmica do sistema torna-se independente do tamanho do reservatório, descrevendo então um fluxo exponencial de energia do sistema para o ambiente. Nestas condições, torna-se possível interpretar o movimento do oscilador harmônico, a partir de uma única realização, simplesmente como um oscilador harmônico amortecido. O caso do banho no regime caótico é o que interessa neste trabalho, sendo o restante dos resultados direcionados a este caso.

No Cap. 4, falamos sobre um sistema caótico rápido e de baixa dimensionalidade acoplado a um sistema de interesse lento. O resultado desta construção é um processo de troca de energia entre ambos. Neste caso aqui, também podemos pensar o oscilador harmônico como um sistema lento e o banho de N sistemas caóticos como o sistema rápido. Desta forma, tudo indica que uma mudança na frequência ω_0 do oscilador altera a forma do fluxo de energia para o banho. Este fato realmente ocorre e é apresentado na Fig. 5.8. Logo, como no caso de banhos caóticos de baixa dimensionalidade, como aqueles discutidos no Cap. 4, aqui também é importante a velocidade do sistema, afetando o fluxo de energia para o reservatório.

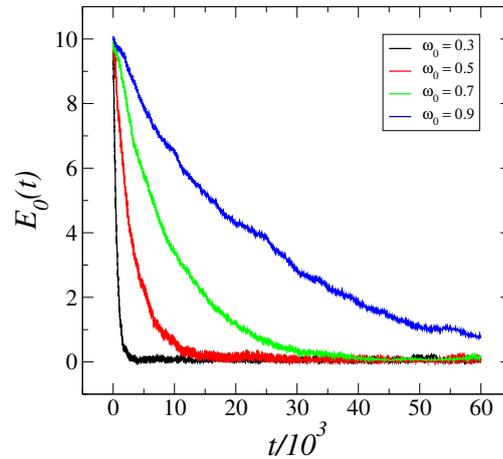


Figura 5.8: Energia do sistema para um banho com $N = 2.000$ e $a = 10^{-3}$. Uma pequena média de 10 realizações foi utilizada agora, apenas para evitar pequenas flutuações devido à escolha da condição inicial.

O que observamos pelas Figs. 5.6(c) e 5.8, é que para tempos longos, quase toda a energia do sistema é absorvida pelo banho caótico. Pelo Teorema de Recorrência de Poincaré, um ciclo deveria ser observado neste processo e o sistema absorveria a energia novamente do reservatório. No entanto, o que ocorre, é que a presença do caos no ambiente acaba tornando este tempo muito longo, fazendo a energia nunca mais retornar [34].

Como a energia flui do sistema para o reservatório e lá permanece, é interessante observar como é a função distribuição das energias do banho e sistema quando este estado de equilíbrio é alcançado. Chamamos aqui estado de equilíbrio o comportamento à tempos longos, aquele no qual aparentemente não ocorre mais trocas de energia.

Para obter a função distribuição, usaremos duas técnicas diferentes, as quais chamaremos distribuição de ensemble e distribuição no tempo. Em ambas as situações $a = 0,01$, $\omega_0 = 0,3$ e $N = 2.000$.

Para a distribuição de ensemble, integramos o sistema (5.1) a partir de 10.000 condições iniciais. Em $t = 0$, sempre utilizamos a distribuição Pseudo-Canônica para escolher as energias do banho. Quando o sistema atinge o estado de equilíbrio, $t = 2.000$, o valor da energia de cada elemento do banho e a do oscilador harmônico é armazenada, para cada uma das condições iniciais. Com todos estes dados, é possível obter a Fig. 5.9, que é distribuição de energias do sistema e do banho, no equilíbrio, para um ensemble de realizações.

Para a distribuição no tempo, integramos o sistema a partir de uma única condição inicial até atingir o estado de equilíbrio em $t = 2.000$. A partir deste instante, coletamos

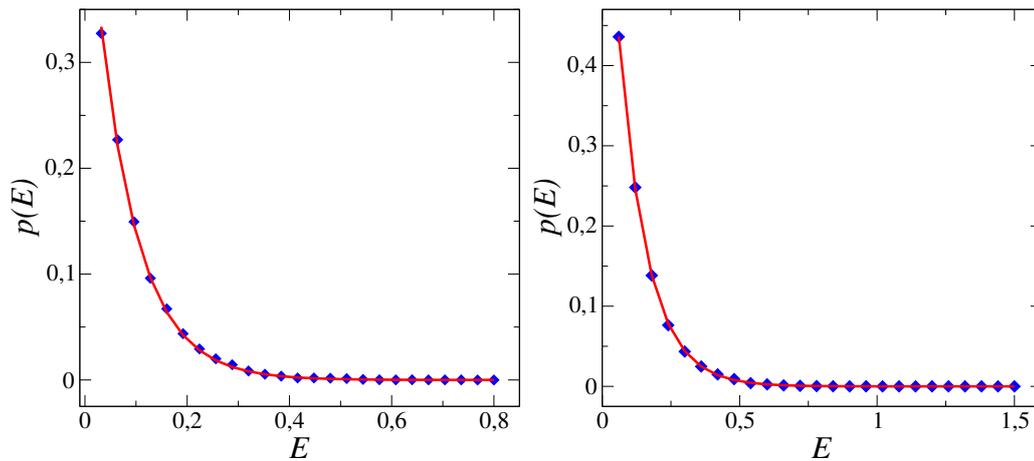


Figura 5.9: Distribuição das energias no ensemble para (a) sistema e (b) banho, com $N = 2.000$ e $a = 0,01$. Os pontos azuis são os dados obtidos das simulações numéricas e a linha vermelha o “fit” exponencial.

a energia de cada elemento do banho e do oscilador harmônico 10.000 vezes, em intervalos de tempo aleatórios $0 < t < 10^3$. Com estes dados obtemos a Fig. 5.10.

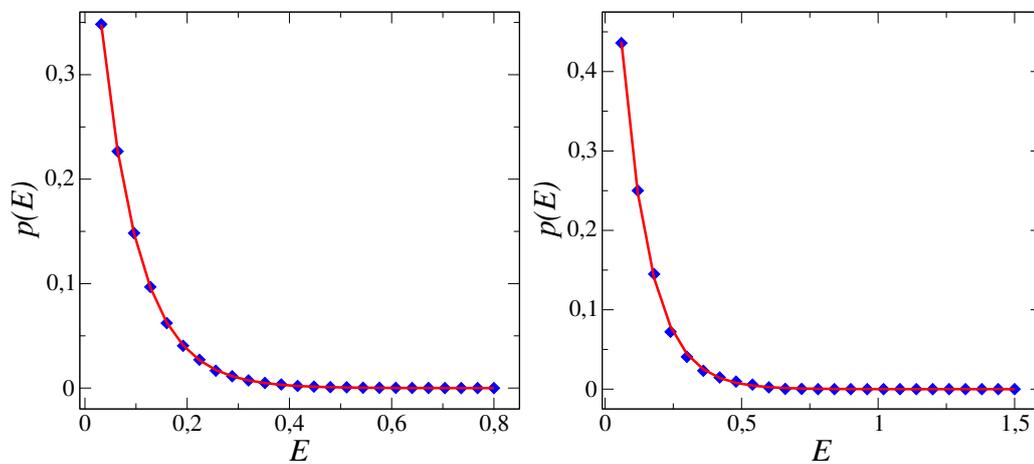


Figura 5.10: Distribuição das energias no tempo para (a) sistema e (b) banho, com $N = 2.000$ e $a = 0,01$.

O que se pode observar, é que tanto no ensemble como no tempo, a distribuição de equilíbrio é do tipo Boltzmann, indicando termalização entre sistema e ambiente. Isto nos permite definir uma energia média de equilíbrio para ambos, utilizando o Teorema da Equipartição da Energia. Para isto, a partir da Eq. (5.20), primeiramente calculamos a

contribuição de cada grau de liberdade do sistema,

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{k_B T}{2}, \quad (5.26)$$

$$\left\langle \frac{m\omega_0^2 q^2}{2} \right\rangle = \frac{k_B T}{2}, \quad (5.27)$$

tal que a energia média do oscilador no equilíbrio é dada por

$$\bar{E}_{OH} = k_B T, \quad (5.28)$$

onde T é a temperatura de equilíbrio, que não varia mais.

A energia média do oscilador quártico já foi calculada anteriormente e é dada pela Eq. (5.25)

$$\bar{E}_{OQ}^{(e)} = \frac{3}{2} k_B T, \quad (5.29)$$

onde agora utilizamos o índice (e) para indicar que se trata da energia de equilíbrio para tempos longos. Tanto para o sistema quanto para o banho, T indica a temperatura de equilíbrio, um valor muito pequeno e que não varia mais. Eliminando $k_B T$ nas Eqs. (5.28) e (5.29), obtemos uma relação entre a energia de equilíbrio do sistema e do banho, a qual é dada por [32]

$$\bar{E}_{OQ}^{(e)} = \frac{3}{2} \bar{E}_{OH} \quad (5.30)$$

O termo de interação não apresenta nenhuma contribuição, pois Hamiltonianos do sistema e do banho são pares enquanto que a interação uma função linear das coordenadas de ambos.

O cálculo de $k_B T$ permite obter os valores das energias de equilíbrio. Para isso, utilizamos a conservação da energia total, sistema + banho + interação. A energia total E_{tot} pode ser escrita como

$$E_{tot} = E_O + N \bar{E}_{OQ}, \quad (5.31)$$

onde E_O é a energia inicial do OH e consideramos, apenas para efeitos de cálculo, que todos os osciladores iniciam com um valor de energia, o qual é igual a sua energia média inicial \bar{E}_{OQ} . No equilíbrio, toda a energia inicial estará dividida entre os graus de liberdade

do sistema e do banho, de forma que podemos escrever [32]

$$E_{tot} = k_B T + \frac{3}{2} N k_B T = \left(1 + \frac{3}{2} N\right) k_B T = E_O + N \bar{E}_{OQ}. \quad (5.32)$$

Isolando $k_B T$ na Eq. (5.32),

$$k_B T = \frac{2}{2 + 3N} (E_O + N \bar{E}_{OQ}), \quad (5.33)$$

que fornece a temperatura T de equilíbrio em termos da energia inicial do sistema e da energia média do banho e do seu número de elementos.

Fazendo $N = 2.000$, $E_O = 10,0$ e $\bar{E}_{OQ} = 0,1$, chegamos em

$$\bar{E}_{OH} = 0,0700 \quad (5.34)$$

$$\bar{E}_{OQ}^{(e)} = 0,105. \quad (5.35)$$

Como a distribuição de equilíbrio é do tipo Boltzmann [60], ela pode ser ajustada pela equação

$$p(E) = \frac{1}{\bar{E}} e^{-E/\bar{E}}, \quad (5.36)$$

onde \bar{E} é a energia média de equilíbrio. Isto nos permite comparar os resultados do Teorema da Equipartição da Energia com os dados numéricos. Fazemos isso para o caso da distribuição temporal e de ensemble. Os resultados são:

Equilíbrio	Tempo	Ensemble
\bar{E}_{OH}	0,0747	0,0775
$\bar{E}_{OQ}^{(e)}$	0,105	0,105

Este resultado mostra que realmente o sistema está em equilíbrio com o banho, além de comprovar, com a proximidade dos valores obtidos para a distribuição temporal e de ensemble, que o sistema é ergódico. Vale a pena ressaltar, que resultados semelhantes a estes obtidos para a distribuição das energias do banho e do sistema já foram apresentados em [32, 57], mas para o caso $N = 100$, onde a concordância entre os resultados numéricos e os obtidos via Teorema da Equipartição da Energia também ocorre.

O que mostramos nesta seção, é que para um banho caótico composto de N elementos, ocorre um fluxo de energia do sistema para o reservatório, sendo possível observar este fato para apenas uma realização. Quando um estado de equilíbrio entre sistema e ambiente

é alcançado, observa-se que ambos obedecem a uma distribuição do tipo Boltzmann, indicando termalização. Este fato nos abre uma porta de investigação, uma vez que se a distribuição de equilíbrio do banho é tipo Boltzmann, ela não muda muito do seu formato inicial, fornecido pela distribuição Pseudo-Canônica. Isto permite utilizar a Teoria da Resposta Linear para calcular a função de distribuição do banho a medida que o sistema evolui no tempo. Baseado nesta ideia, na próxima seção, partiremos para uma solução analítica do problema de um oscilador harmônico acoplado a um banho de osciladores caóticos. Tal solução está baseada na Teoria da Resposta Linear, que irá apresentar os elementos responsáveis pela dissipação da energia do sistema.

5.4 A Equação do Movimento para o Sistema

Consideremos o Hamiltoniano do problema completo [32]

$$H = H_S + H_B + H_I \quad (5.37)$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2 q^2}{2} + \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{p_{x_i}^2 + p_{y_i}^2}{2} + \frac{a}{4} (x_i^4 + y_i^4) + \frac{x_i^2 y_i^2}{2} \right\} + \sum_{i=1}^N \lambda_N x_i q \quad (5.38)$$

A partir das Equações de Hamilton [37], obtemos as equações do movimento para o sistema

$$\dot{q} = \frac{p}{m}, \quad (5.39)$$

$$\dot{p} = -m\omega_0^2 q - \lambda_N \sum_{i=1}^N x_i \quad (5.40)$$

Derivando a Eq. (5.39) em relação ao tempo e substituindo \dot{p} em (5.40), chega-se em

$$m\ddot{q} = -m\omega_0^2 q - \lambda_N \sum_{i=1}^N x_i, \quad (5.41)$$

que pode ser reescrita como

$$\ddot{q} + \omega_0^2 q = -\frac{\lambda_N}{m} \sum_{i=1}^N x_i = -\frac{\lambda_N}{m} X(t), \quad (5.42)$$

onde

$$X(t) = \sum_{i=1}^N x_i. \quad (5.43)$$

Para o banho em um regime caótico, que é a situação que nos interessa aqui, podemos substituir a Eq. (5.43) pelo seu valor médio obtido fazendo uma média de ensemble, de tal forma que (5.42) torna-se

$$\ddot{q} + \omega_0^2 q \approx -\frac{\lambda_N}{m} \langle X(t) \rangle \quad (5.44)$$

Para obter $\langle X(t) \rangle$, usaremos a Teoria da Resposta Linear juntamente com os resultados da Sec. 5.3. Conforme observamos, para tempos longos, o banho tende a uma distribuição do tipo Boltzmann. Como a distribuição inicial é a distribuição Pseudo-Canônica, podemos dizer que a função distribuição não muda muito da sua forma inicial, sendo as correções lineares suficientes para descrever esta mudança (mais detalhes sobre a evolução da função distribuição de um banho formado de OQ's, são descritos nas Refs. [32, 57]). Tal fato é apresentado na Fig. 5.11, onde temos a função distribuição das energias do banho em $t = 0$ e $t = 2.000$, quando sistema e ambiente já atingiram o equilíbrio.

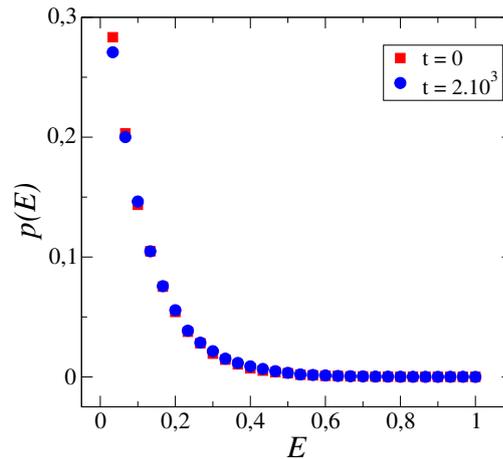


Figura 5.11: Função distribuição no ensemble para $t = 0$ e $t = 2.000$, com $N = 2.000$ e $a = 0,01$. A frequência do sistema é $\omega_0 = 0,3$.

O que faremos agora, é considerar o movimento do oscilador como uma perturbação no banho caótico, calculando a evolução temporal do valor médio de uma grandeza do

reservatório. Para isto, partimos da Eq. (4.25)

$$\langle B(Q, P) \rangle (t) = \langle B[Q(t), P(t)] \rangle_e + \int_{t_0}^t \phi_{BA}(t-s) \chi(s) ds. \quad (5.45)$$

onde

$$\phi_{BA}(t-s) = \langle \{A[Q(t), P(t)], B[Q(s), P(s)]\} \rangle_e. \quad (5.46)$$

Queremos calcular o valor médio de $X(t)$, logo $B(Q, P) = X(t)$. Além disso, podemos escrever o termo de interação na forma (4.6), tal que $A(Q, P) = X(t)$ e $\chi(s) = -\lambda_N q(s)$. Com isso, (5.45) torna-se

$$\langle X(t) \rangle = \langle X(t) \rangle_e - \lambda_N \int_0^t \phi_{XX}(t-s) q(s) ds. \quad (5.47)$$

$\langle \dots \rangle_e$ indica que a média é calculada considerando o banho desacoplado do sistema, ou seja, sem considerar qualquer efeito de acoplamento. Já o termo $\langle \dots \rangle$, indica que a média é obtida considerando a evolução do banho acoplado ao sistema.

Como o Hamiltoniano do banho é par, o primeiro termo do lado direito de (5.47) é zero,

$$\langle X(t) \rangle_e = 0, \quad (5.48)$$

e a Eq. (5.47) é escrita como

$$\langle X(t) \rangle = -\lambda_N \int_0^t \phi_{XX}(t-s) q(s) ds. \quad (5.49)$$

Agora, substituindo a Eq. (5.49) em (5.44), temos

$$\ddot{q} + \omega_0^2 q = \frac{\lambda_N^2}{m} \int_0^t \phi_{XX}(t-s) q(s) ds \quad (5.50)$$

Analisando a Eq. (5.50), podemos observar que toda a informação referente aos efeitos do banho sob o movimento do sistema está contida dentro do função resposta $\phi_{XX}(t-s)$. Para os casos de banho frio, onde $\bar{E}_{OQ} \ll E_0$ (10% ou menos), o que observamos, é que a energia do sistema apresenta um decaimento exponencial e tende a zero para tempos longos (Fig. 5.8). Este fato permite interpretar a dinâmica do oscilador como um oscilador harmônico amortecido, cuja energia é perdida para o banho. Contudo, para que

isto ocorra, precisamos de um termo de atrito proporcional a velocidade do sistema na Eq. (5.50). Para isso, calculamos a função resposta (5.46) em $s = 0$,

$$\phi_{XX}(t) = \int X(t) \{\rho_e(Q, P), X(0)\} dQdP, \quad (5.51)$$

onde

$$dQdP = \prod_{i=1}^N dx_i dy_i dp_{x_i} dp_{y_i}. \quad (5.52)$$

Utilizando os mesmos passos apresentados nas Refs. [32, 57] (ver Apêndice C), podemos reescrever a Eq. (5.51) como

$$\phi_{XX}(t-s) = \frac{5}{4} \frac{d}{ds} C_N(t-s) + \frac{(t-s)}{4} \frac{d^2}{dsdt} C_N(t-s), \quad (5.53)$$

onde

$$C_N(t-s) = \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{x_i(t)x_i(s)}{E_B^{(i)}} \right\rangle_e. \quad (5.54)$$

$E_B^{(i)}$ indica as energias iniciais dos elementos do banho, antes do acoplamento, obtidos com a distribuição Pseudo-Canônica.

Trabalhamos agora a segunda derivada do lado direito da Eq. (5.53),

$$\frac{(t-s)}{4} \frac{d^2}{dsdt} C_N(t-s) = \frac{d}{ds} \left(\frac{(t-s)}{4} \frac{d}{dt} C_N(t-s) - \frac{1}{4} C_N(t-s) \right), \quad (5.55)$$

onde usamos o fato que $\frac{d}{dt} = -\frac{d}{ds}$. Assim, a Eq. (5.53) pode ser reescrita como

$$\phi_{XX}(t-s) = \frac{d}{ds} \left(\frac{5}{4} C_N(t-s) + \frac{(t-s)}{4} \frac{d}{dt} C_N(t-s) - \frac{1}{4} C_N(t-s) \right), \quad (5.56)$$

$$\phi_{XX}(t-s) = \frac{d}{ds} \left(C_N(t-s) + \frac{(t-s)}{4} \frac{d}{dt} C_N(t-s) \right). \quad (5.57)$$

Definimos agora

$$\alpha(t-s) = C_N(t-s) + \frac{(t-s)}{4} \frac{d}{dt} C_N(t-s), \quad (5.58)$$

de forma que a função resposta (5.53) pode ser escrita de forma compacta como

$$\phi_{XX}(t-s) = \frac{d\alpha(t-s)}{ds}. \quad (5.59)$$

Voltamos agora para a equação do movimento do sistema (5.50)

$$\ddot{q} + \omega_0^2 q = \frac{\lambda_N^2}{m} \int_0^t \phi_{XX}(t-s)q(s)ds. \quad (5.60)$$

Utilizando a Eq. (5.59), podemos usar a fórmula da integração por partes [61]

$$\int_0^t u dv = uv \Big|_0^t - \int_0^t v du, \quad (5.61)$$

e calcular a integral do lado direito de (5.60). Para isso, fazemos

$$\frac{d\alpha(t-s)}{ds} = dv, \quad (5.62)$$

$$q(s) = u, \quad (5.63)$$

que fornece

$$v = \alpha(t-s), \quad (5.64)$$

$$du = \dot{q}(s)ds. \quad (5.65)$$

Agora aplicamos a fórmula (5.61) da integral por partes em (5.60), obtendo

$$\ddot{q} + \omega_0^2 q = \frac{\lambda_N^2}{m} \left\{ q(s)\alpha(t-s) \Big|_0^t - \int_0^t \alpha(t-s)\dot{q}(s)ds \right\}. \quad (5.66)$$

Pela escolha das condições iniciais,

$$q(0) = 0, \quad (5.67)$$

Eq. (5.66) pode ser escrita como

$$\ddot{q} + \omega_0^2 q = \frac{\lambda_N^2}{m} q(t)\alpha(0) - \frac{\lambda_N^2}{m} \int_0^t \alpha(t-s)\dot{q}(s)ds. \quad (5.68)$$

Podemos ainda definir uma nova frequência para o sistema,

$$\omega^2 = \omega_0^2 - \frac{\lambda_N^2}{m} \alpha(0), \quad (5.69)$$

tal que a equação do movimento para o sistema torna-se

$$\ddot{q} + \omega^2 q = -\frac{\lambda_N^2}{m} \int_0^t \alpha(t-s)\dot{q}(s)ds. \quad (5.70)$$

A Eq. (5.70) agora possui um termo proporcional a velocidade do sistema dentro da integral em s . Esta integral pode ser interpretada como um termo responsável pela dissipação e que contém todos os efeitos de memória do banho, similar ao termo de memória presente no modelo Caldeira-Leggett [4].

O que faremos agora, é tentar resolver a integral no lado direito de (5.70), escrevendo a equação do movimento para o sistema como

$$\ddot{q} + \gamma\dot{q} + \omega^2q = 0, \quad (5.71)$$

onde γ é o termo responsável pela dissipação. Podemos adiantar, pelos resultados que obtivemos até agora, que γ será uma função dos parâmetros do banho e independente de N , para N grande (Fig. 5.6(c)). Além disso, deve ser uma função da frequência ω_0 do sistema, conforme constata-se na Fig. 5.8.

5.5 O Termo de Dissipação

Iniciamos com a equação do movimento para o sistema

$$\ddot{q} + \omega^2q = -\frac{\lambda_N^2}{m} \int_0^t \alpha(t-s)\dot{q}(s)ds. \quad (5.72)$$

A solução da integral do lado direito envolve a função $\alpha(t-s)$, a qual é dada por

$$\alpha(t-s) = C_N(t-s) + \frac{(t-s)}{4} \frac{d}{dt} C_N(t-s), \quad (5.73)$$

onde

$$C_N(t-s) = \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{x_i(t)x_i(s)}{E_B^{(i)}} \right\rangle_e. \quad (5.74)$$

Devido as variáveis x_i estarem relacionadas ao sistema caótico, torna-se impossível calcular analiticamente a Eq. (5.74), e conseqüentemente (5.73). Portanto, o que faremos, é calcular $\alpha(t-s)$ numericamente. Para isso, precisamos definir como obter a derivada temporal do lado direito da Eq. (5.73). $C_N(t-s)$ é função de $x_i(t)$, $x_i(s)$ e $E_B^{(i)}$. O primeiro termo é o único que possui dependência em t , pois $x_i(s)$ é função somente de s . Quanto a $E_B^{(i)}$, ele se refere as energias iniciais do banho obtidas pela distribuição Pseudo-Canônica. Como a média é obtida para o banho desacoplado do sistema, a distribuição das energias

se mantém constante no tempo, conseqüentemente, $E_B^{(i)}$ também. Utilizando as Equações de Hamilton do movimento para os elementos do banho, obtemos

$$p_{x_i}(t) = \frac{dx_i(t)}{dt} \quad (5.75)$$

Assim,

$$\frac{dC_N(t-s)}{dt} = \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{p_{x_i}(t)x_i(s)}{E_B^{(i)}} \right\rangle_e, \quad (5.76)$$

e conseqüentemente

$$\alpha(t-s) = \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{x_i(t)x_i(s)}{E_B^{(i)}} \right\rangle_e + \frac{(t-s)}{4} \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{p_{x_i}(t)x_i(s)}{E_B^{(i)}} \right\rangle_e. \quad (5.77)$$

A Fig. 5.12 mostra o comportamento de (5.77) para diferentes valores de s .

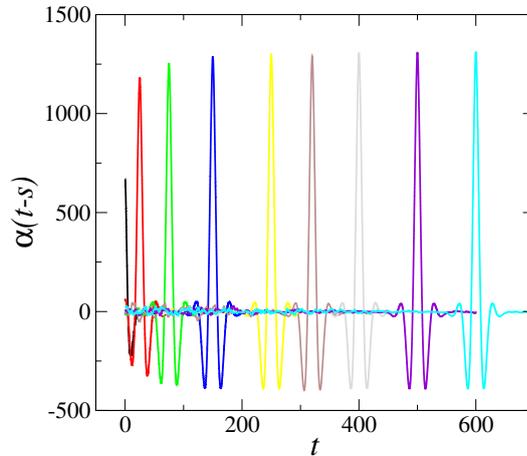


Figura 5.12: $\alpha(t-s)$ para, da esquerda para a direita, $s = 0, 25, 75, 150, 250, 325, 400, 500$ e 600 . $a = 0,01$ e $N = 100$. A média foi calculada utilizando 10^5 realizações.

Para sua construção, escolhemos um banho constituído de 100 osciladores quárticos e desacoplado do sistema. Utilizando a distribuição (5.18), escolhemos as energias iniciais $E_B^{(i)}$, a partir das quais, pela parametrização (5.10)-(5.13), escolhemos as condições iniciais dos 100 OQ's. A partir disso, integramos as equações do movimento para cada elemento do banho até s , quando armazenamos os valores de posição e momento. Após armazenar os valores do banho para s , integra-se novamente as equações do movimento com as mesmas condições iniciais utilizadas para obter os momentos e posições em t . Esta segunda integração representa os valores em t . Calcula-se então as somas em $\alpha(t-s)$, utilizando

valores de t maiores e menores que s . Isto caracteriza uma realização na média. Repete-se este procedimento 10^5 vezes, calculando-se por fim a média das somas.

O que fica claro na Fig. 5.12, é que $\alpha(t - s)$ é uma função bem localizada em torno de s . Além disso, observa-se que o pico da função tende a um valor constante a medida que s aumenta. Isto nos permite pensar que $\alpha(t - s)$ é independente de s para $s > 150$. Ou seja, para $s > 150$, a formato da curva é sempre o mesmo.

O comportamento bem localizado de (5.77), induz uma aproximação para a (5.77) como

$$\alpha(t - s) \approx C\delta(t - s), \quad (5.78)$$

onde C é uma constante e $\delta(t - s)$ é a função Delta de Dirac [61]. No entanto, esta aproximação só será válida caso a função $\dot{q}(s) = p(s)/m$ não apresente muitas oscilações comparado ao intervalo de tempo em que a função (5.77) tem seu pico. Porém, isto não é verdade, conforme pode ser observado na Fig. 5.13, impossibilitando a aproximação.

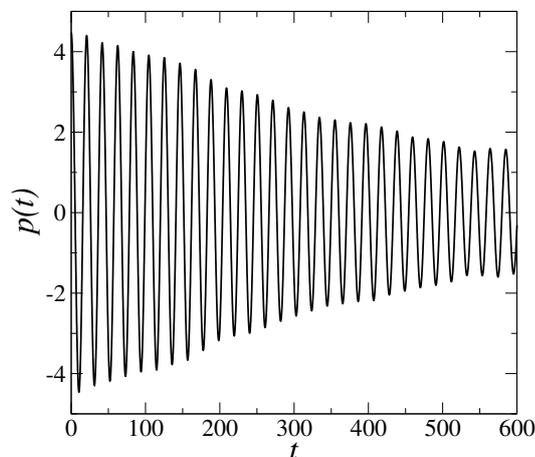


Figura 5.13: $p(t)$ para $\omega_0 = 0,3$, $N = 2.000$, $a = 0,01$.

Com isto, o que precisamos fazer, é recorrer a uma transformação de variáveis, tal que a função $\dot{q}(s)$ varie muito pouco durante o intervalo de tempo em que $\alpha(t - s)$ é diferente de zero. Com este objetivo, partimos das equações do movimento para o sistema e suas

derivadas

$$p = m\dot{q}, \quad (5.79)$$

$$\dot{q} = \frac{p}{m}, \quad (5.80)$$

$$\dot{p} = m\ddot{q}, \quad (5.81)$$

$$\dot{p} = -m\omega^2 q - \lambda_N^2 \int_0^t ds \alpha(t-s) \dot{q}(s). \quad (5.82)$$

Agora, escrevemos as Eqs. (5.80) e (5.82) na forma matricial,

$$\begin{pmatrix} \dot{q}(t) \\ \dot{p}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{p(t)}{m} \\ -m\omega^2 q(t) \end{pmatrix} - \frac{\lambda_N^2}{m} \int_0^t ds \alpha(t-s) \begin{pmatrix} 0 \\ p(s) \end{pmatrix}. \quad (5.83)$$

Se definirmos

$$\underline{\alpha}(t-s) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \alpha(t-s) \end{pmatrix}, \quad (5.84)$$

e escrevermos,

$$\begin{pmatrix} \frac{p(t)}{m} \\ -m\omega^2 q(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{m} \\ -m\omega^2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix}, \quad (5.85)$$

podemos definir a matriz Ω como

$$\Omega = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{m} \\ -m\omega^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.86)$$

tal que a Eq. (5.83) torna-se

$$\begin{pmatrix} \dot{q}(t) \\ \dot{p}(t) \end{pmatrix} = \Omega \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} - \frac{\lambda_N^2}{m} \int_0^t ds \underline{\alpha}(t-s) \begin{pmatrix} q(s) \\ p(s) \end{pmatrix} ds. \quad (5.87)$$

Neste ponto, estamos aptos a definir o conjunto de variáveis “lentas” (\tilde{q}, \tilde{p}) em termos das variáveis “rápidas” (q, p) da seguinte forma,

$$\begin{pmatrix} \tilde{q}(t) \\ \tilde{p}(t) \end{pmatrix} = e^{-\Omega t} \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix}. \quad (5.88)$$

A transformação inversa é dada por,

$$\begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = e^{\Omega t} \begin{pmatrix} \tilde{q}(t) \\ \tilde{p}(t) \end{pmatrix}. \quad (5.89)$$

Calculando a derivada da Eq. (5.88), temos

$$\begin{pmatrix} \dot{q}(t) \\ \dot{p}(t) \end{pmatrix} = -\Omega e^{-\Omega t} \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} + e^{-\Omega t} \begin{pmatrix} \dot{q}(t) \\ \dot{p}(t) \end{pmatrix}. \quad (5.90)$$

Substituindo Eq. (5.87) na Eq. (5.90), chegamos em

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \dot{q}(t) \\ \dot{p}(t) \end{pmatrix} &= -\Omega e^{-\Omega t} \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} + e^{-\Omega t} \Omega \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} \\ &\quad - \frac{e^{-\Omega t} \lambda_N^2}{m} \int_0^t \underline{\alpha}(t-s) e^{\Omega s} \begin{pmatrix} \tilde{q}(s) \\ \tilde{p}(s) \end{pmatrix} ds, \end{aligned} \quad (5.91)$$

ou

$$\begin{pmatrix} \dot{q}(t) \\ \dot{p}(t) \end{pmatrix} = -\frac{\lambda_N^2}{m} \int_0^t e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s) e^{\Omega s} \begin{pmatrix} \tilde{q}(s) \\ \tilde{p}(s) \end{pmatrix} ds. \quad (5.92)$$

Precisamos agora obter $e^{\Omega t}$. Para isso, consideramos a solução desacoplada do oscilador harmônico, a qual pode ser escrita como,

$$\begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = e^{\Omega t} \begin{pmatrix} q(0) \\ p(0) \end{pmatrix}, \quad (5.93)$$

ou ainda

$$\begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\omega t) & \frac{\sin(\omega t)}{m\omega} \\ -m\omega \sin(\omega t) & \cos(\omega t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q(0) \\ p(0) \end{pmatrix}. \quad (5.94)$$

Comparando (5.94) e (5.93), chegamos ao nosso objetivo,

$$e^{\Omega t} = \begin{pmatrix} \cos(\omega t) & \frac{\sin(\omega t)}{m\omega} \\ -m\omega \sin(\omega t) & \cos(\omega t) \end{pmatrix}, \quad (5.95)$$

e conseqüentemente,

$$e^{-\Omega t} = \begin{pmatrix} \cos(\omega t) & -\frac{\sin(\omega t)}{m\omega} \\ m\omega \sin(\omega t) & \cos(\omega t) \end{pmatrix}. \quad (5.96)$$

O que fizemos aqui para obter $e^{\Omega t}$, foi considerar que a solução do oscilador acoplado é dada pela sua solução desacoplada, mais uma série com potências em λ_N . No entanto, estamos interessados em um regime de acoplamento fraco, mantendo somente termos de ordem λ_N^2 . Assim, se mantivermos um termo linear no acoplamento em $e^{\Omega t}$, quando a multiplicação de matrizes dentro da integral em (5.92) for executada, ele dará origem a termos de ordem maior que dois, o que não nos interessa.

Agora, podemos multiplicar as matrizes no integrando da Eq. (5.92),

$$e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s) e^{\Omega s} = \begin{pmatrix} \cos(\omega t) & -\frac{\sin(\omega t)}{m\omega} \\ m\omega \sin(\omega t) & \cos(\omega t) \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \alpha(t-s) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\omega s) & \frac{\sin(\omega s)}{m\omega} \\ -m\omega \sin(\omega s) & \cos(\omega s) \end{pmatrix}, \quad (5.97)$$

$$e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s) e^{\Omega s} = \begin{pmatrix} \alpha(t-s) \sin(\omega t) \sin(\omega s) & -\frac{\alpha(t-s) \sin(\omega t) \cos(\omega s)}{m\omega} \\ -m\omega \alpha(t-s) \cos(\omega t) \sin(\omega s) & \alpha(t-s) \cos(\omega t) \cos(\omega s) \end{pmatrix}. \quad (5.98)$$

Voltamos agora para a equação do movimento,

$$\begin{pmatrix} \dot{\tilde{q}}(t) \\ \dot{\tilde{p}}(t) \end{pmatrix} = -\frac{\lambda_N^2}{m} \int_0^t e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s) e^{\Omega s} \begin{pmatrix} \tilde{q}(s) \\ \tilde{p}(s) \end{pmatrix} ds. \quad (5.99)$$

O motivo de fazermos a mudança de variáveis das “rápidas” para as “lentas”, aparece justamente neste momento. Devido à forma como a transformação é definida, (5.88), se ela for aplicada a equação de movimento do oscilador harmônico desacoplado (5.93), o que se observa é que nas novas variáveis, todas as oscilações desaparecem, tornando a solução constante. Para o caso da Eq. (5.99), faremos a mesma consideração, ou seja, vamos considerar que as variáveis “lentas” se mantêm praticamente constante perante o produto $e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s) e^{\Omega s}$, o que permite colocá-las para fora da integral como uma função de t . Isto é,

$$\begin{pmatrix} \dot{\tilde{q}}(t) \\ \dot{\tilde{p}}(t) \end{pmatrix} = -\frac{\lambda_N^2}{m} \int_0^t e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s) e^{\Omega s} ds \begin{pmatrix} \tilde{q}(t) \\ \tilde{p}(t) \end{pmatrix}, \quad (5.100)$$

ou ainda

$$\begin{pmatrix} \dot{\tilde{q}}(t) \\ \dot{\tilde{p}}(t) \end{pmatrix} = \gamma_T(\omega_0, t) \begin{pmatrix} \tilde{q}(t) \\ \tilde{p}(t) \end{pmatrix}, \quad (5.101)$$

onde

$$\gamma_T(\omega_0, t) = -\frac{\lambda_N^2}{m} \int_0^t e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s) e^{\Omega s} ds. \quad (5.102)$$

Fazendo a multiplicação das matrizes no integrando, chegamos em

$$\gamma_T(\omega_0, t) = -\frac{\lambda_N^2}{m} \begin{pmatrix} (e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s) e^{\Omega s})_{11} & (e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s) e^{\Omega s})_{12} \\ (e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s) e^{\Omega s})_{21} & (e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s) e^{\Omega s})_{22} \end{pmatrix}, \quad (5.103)$$

onde

$$(e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s) e^{\Omega s})_{11} = \int_0^t ds \alpha(t-s) \sin(\omega t) \sin(\omega s), \quad (5.104)$$

$$(e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s) e^{\Omega s})_{12} = -\int_0^t ds \frac{\alpha(t-s) \sin(\omega t) \cos(\omega s)}{m\omega}, \quad (5.105)$$

$$(e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s) e^{\Omega s})_{21} = -m\omega \int_0^t ds \alpha(t-s) \cos(\omega t) \sin(\omega s), \quad (5.106)$$

$$(e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s) e^{\Omega s})_{22} = \int_0^t ds \alpha(t-s) \cos(\omega t) \cos(\omega s). \quad (5.107)$$

Fazendo a mudança de variáveis

$$u = t - s, \quad (5.108)$$

obtemos,

$$(e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s) e^{\Omega s})_{11} = \int_0^t du \alpha(u) \sin(\omega t) \sin(\omega(t-u)), \quad (5.109)$$

$$(e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s) e^{\Omega s})_{12} = -\int_0^t du \frac{\alpha(u) \sin(\omega t) \cos(\omega(t-u))}{m\omega}, \quad (5.110)$$

$$(e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s) e^{\Omega s})_{21} = -m\omega \int_0^t du \alpha(u) \cos(\omega t) \sin(\omega(t-u)), \quad (5.111)$$

$$(e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s) e^{\Omega s})_{22} = \int_0^t du \alpha(u) \cos(\omega t) \cos(\omega(t-u)). \quad (5.112)$$

Aplicando as relações abaixo para a soma de arcos [61],

$$\sin(\alpha - \beta) = \sin(\alpha) \cos(\beta) - \sin(\beta) \cos(\alpha) \quad (5.113)$$

$$\sin(\alpha + \beta) = \sin(\alpha) \cos(\beta) + \sin(\beta) \cos(\alpha), \quad (5.114)$$

(5.109), (5.110), (5.111) e (5.112), tornam-se

$$\begin{aligned} (e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s)e^{\Omega s})_{11} &= \sin^2(\omega t) \int_0^t du \alpha(u) \cos(\omega u) \\ &\quad - \sin(\omega t) \cos(\omega t) \int_0^t du \alpha(u) \sin(\omega u), \end{aligned} \quad (5.115)$$

$$\begin{aligned} (e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s)e^{\Omega s})_{12} &= -\frac{\sin(\omega t) \cos(\omega t)}{m\omega} \int_0^t du \alpha(u) \cos(\omega u) \\ &\quad - \frac{\sin^2(\omega t)}{m\omega} \int_0^t du \alpha(u) \sin(\omega u), \end{aligned} \quad (5.116)$$

$$\begin{aligned} (e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s)e^{\Omega s})_{21} &= -m\omega \sin(\omega t) \cos(\omega t) \int_0^t du \alpha(u) \cos(\omega u) \\ &\quad + m\omega \cos^2(\omega t) \int_0^t du \alpha(u) \sin(\omega u), \end{aligned} \quad (5.117)$$

$$\begin{aligned} (e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s)e^{\Omega s})_{22} &= \cos^2(\omega t) \int_0^t du \alpha(u) \cos(\omega u) \\ &\quad + \sin(\omega t) \cos(\omega t) \int_0^t du \alpha(u) \sin(\omega u). \end{aligned} \quad (5.118)$$

Definindo

$$c_1(t) = -\int_0^t du \alpha(u) \cos(\omega u), \quad (5.119)$$

$$c_2(t) = -\int_0^t du \alpha(u) \sin(\omega u), \quad (5.120)$$

temos,

$$(e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s)e^{\Omega s})_{11} = -\sin^2(\omega t)c_1(t) + \sin(\omega t) \cos(\omega t)c_2(t), \quad (5.121)$$

$$(e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s)e^{\Omega s})_{12} = \frac{\sin(\omega t) \cos(\omega t)}{m\omega} c_1(t) + \frac{\sin^2(\omega t)}{m\omega} c_2(t), \quad (5.122)$$

$$(e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s)e^{\Omega s})_{21} = +m\omega \sin(\omega t) \cos(\omega t)c_1(t) - m\omega \cos^2(\omega t)c_2(t), \quad (5.123)$$

$$(e^{-\Omega t} \underline{\alpha}(t-s)e^{\Omega s})_{22} = -\cos^2(\omega t)c_1(t) - \sin(\omega t) \cos(\omega t)c_2(t). \quad (5.124)$$

Com isto, podemos reescrever a Eq. (5.103),

$$\gamma_T(\omega_0, t) = \frac{\lambda_N^2}{m} \times \begin{pmatrix} \sin^2(\omega t)c_1(t) - \sin(\omega t)\cos(\omega t)c_2(t) & -\frac{\sin(\omega t)\cos(\omega t)}{m\omega}c_1(t) - \frac{\sin^2(\omega t)}{m\omega}c_2(t) \\ -m\omega\sin(\omega t)\cos(\omega t)c_1(t) + m\omega\cos^2(\omega t)c_2(t) & \cos^2(\omega t)c_1(t) + \sin(\omega t)\cos(\omega t)c_2(t) \end{pmatrix}. \quad (5.125)$$

Derivando a transformação (5.88) em relação ao tempo, podemos voltar para as variáveis “lentas”.

$$\begin{pmatrix} \dot{\tilde{q}}(t) \\ \dot{\tilde{p}}(t) \end{pmatrix} = -\Omega e^{-\Omega t} \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} + e^{-\Omega t} \begin{pmatrix} \dot{q}(t) \\ \dot{p}(t) \end{pmatrix}. \quad (5.126)$$

Substituindo (5.101) em (5.126),

$$-\Omega e^{-\Omega t} \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} + e^{-\Omega t} \begin{pmatrix} \dot{q}(t) \\ \dot{p}(t) \end{pmatrix} = \gamma_T(\omega_0, t) \begin{pmatrix} \tilde{q}(t) \\ \tilde{p}(t) \end{pmatrix} \quad (5.127)$$

Utilizando a transformação (5.89) no lado direito da (5.127), multiplicando a equação toda pela esquerda por $e^{\Omega t}$ e isolando as derivadas temporais, temos

$$\begin{pmatrix} \dot{q}(t) \\ \dot{p}(t) \end{pmatrix} = \Omega \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} + e^{\Omega t} \gamma_T(\omega_0, t) e^{-\Omega t} \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix}. \quad (5.128)$$

O cálculo da matriz $e^{\Omega t} \gamma_T(\omega_0, t) e^{-\Omega t}$, fornece

$$e^{\Omega t} \gamma_T(\omega_0, t) e^{-\Omega t} = \frac{\lambda_N^2}{m} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ c_2(t) m\omega & c_1(t) \end{pmatrix}. \quad (5.129)$$

Substituindo Eq. (5.129) em (5.128), chega-se na equação do movimento para o sistema,

$$\dot{q} = \frac{p}{m} \quad (5.130)$$

$$\dot{p} = -\left(m\omega^2 - \lambda_N^2 \omega c_2(t)\right) q + \frac{\lambda_N^2}{m} c_1(t) \dot{q}. \quad (5.131)$$

Derivando (5.130) em relação ao tempo e substituindo \dot{p} em (5.131), obtêm-se o principal resultado desta seção, a equação para o movimento do sistema como um oscilador

harmônico amortecido

$$\ddot{q} - \gamma(\omega_0, t)\dot{q} + \Omega_T^2 q = 0, \quad (5.132)$$

onde

$$\Omega_T^2 = \omega^2 - \frac{\lambda_N^2 \omega c_2(t)}{m}, \quad (5.133)$$

$$\gamma(\omega_0, t) = \gamma = \frac{\lambda_N^2}{m} c_1(t), \quad (5.134)$$

onde passaremos agora a suprimir a dependência de γ com ω_0 e t .

O termo extra em Ω_T^2 é interpretado como uma mudança na energia do oscilador devido ao acoplamento linear. No entanto, ele também carrega um termo de memória, associado a $c_2(t)$.

A Eq. (5.132) é um dos resultados mais importantes deste trabalho, pois descreve a dinâmica do sistema como um oscilador amortecido, o que concorda com a queda exponencial da energia. Além disso, até o momento, nenhuma consideração sobre o tamanho do reservatório foi feita, apenas consideramos obrigatoriamente que seu movimento é caótico. Nas próximas duas subseções, o que faremos é resolver as integrais $c_1(t)$, (5.119), e $c_2(t)$, (5.120), com o que chamaremos de método numérico e método analítico.

5.5.1 A solução Numérica para γ

A solução da equação do movimento para o oscilador harmônico, Eq. (5.132), fornece para a energia do sistema

$$E_0(t) = E_0 e^{-\gamma t}, \quad (5.135)$$

onde E_0 é a energia inicial e γ o que chamaremos de coeficiente de dissipação. Pelas simulações numéricas da Sec. 5.3, (5.135) descreve perfeitamente o comportamento da energia do sistema, tornando assim completamente compatíveis os aspectos numéricos e analíticos sobre a dinâmica do sistema.

Agora resolveremos a integral $c_1(t)$ com o que chamamos de solução numérica, obtendo a dissipação (5.134), denominada γ_{SN} .

Para isso, partimos de $c_1(t)$, que é dado por

$$c_1(t) = - \int_0^t du \alpha(u) \cos(\omega u). \quad (5.136)$$

Fazemos novamente a mudança de variáveis $u = t - s$, tal que (5.136) torna-se

$$c_1(t) = - \int_0^t ds \alpha(t - s) \cos \omega(t - s). \quad (5.137)$$

Como a integração é em s , t pode ser tratado como um parâmetro.

A função $\alpha(t - s)$ é apresentada na Fig. 5.12, porém, lá consideramos s fixo e deixamos t variar. Se o inverso for considerado, t escolhido como fixo e s variar, o formato da curva será o mesmo, porém trocaremos o rótulo t do eixo das abscisas por s . Olhando o comportamento da Fig. 5.12, podemos escrever $\alpha(t - s)$ da seguinte forma

$$\alpha(t - s) = f(t)g(t - s), \quad (5.138)$$

onde o papel de $f(t)$ é descrever o valor do seu pico, o qual tende a uma constante a medida que t cresce. $g(t - s)$ é uma função que possui sempre o mesmo comportamento, independente de qual valor de t escolhermos para construí-la. Este fato pode ser observado na Fig. 5.12, onde o formato da função $\alpha(t - s)$ para $t > 150$ é sempre o mesmo, independente do qual valor de t escolhermos.

Estamos interessados no comportamento do sistema para tempos longos, em que quase toda sua energia é absorvida pelo reservatório. Logo, os valores de $\alpha(t - s)$ para tempos $t < 150$ serão chamados de transiente e não vamos considerá-los. Para tempos $t > 150$, $f(t)$ já possui seu valor constante e $g(t - s)$ pode ser obtida a partir de qualquer valor de t . Isto nos permite calcular a integral $c_1(t)$, no entanto, com a ressalva que sua solução vale para tempos longos.

Desta forma, pegamos a função $\alpha(t - s)$ para um valor de t onde ela já ultrapassou seu comportamento transiente, aqui $t = 300$. Após fazer isto, multiplicamos $\alpha(t - s)$ por $\cos \omega(t - s)$ e “plotamos” o intervalo $0 \leq s \leq 300$. A função $\alpha(t - s)$ e o produto $\alpha(t - s) \cos \omega(t - s)$ são apresentados na Fig. 5.14.

A área sob a curva da Fig. 5.14(b) é justamente a integral (5.136). Se escolhermos outro valor para t , o resultado será o mesmo, pois a função $\alpha(t - s)$ no regime que estamos interessados, é independente dele.

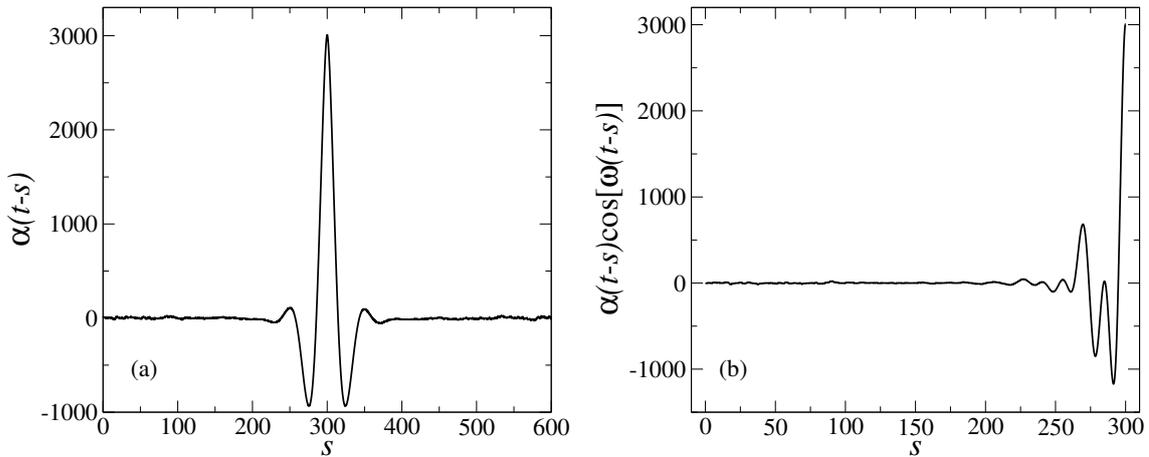


Figura 5.14: (a) Função $\alpha(t-s)$ e (b) Produto $\alpha(t-s)\cos\omega(t-s)$. $a = 10^{-3}$ e $N = 100$. ω é dado pela Eq. (5.69), com $\omega_0 = 0,3$ e $\alpha(0) = 3.003$.

Com o cálculo de $c_1(t)$, obtemos (5.134),

$$\gamma_{SN} = \frac{\lambda_N^2}{m} c_1(t), \quad (5.139)$$

que é o responsável pelo termo de dissipação na equação de movimento do oscilador harmônico.

Para verificar a validade do resultado obtido pelo método acima, precisamos compará-lo com resultados de simulações numéricas. Para isso, integramos todas as $4N+2$ equações do movimento e monitoramos a energia do sistema. Em seguida, aplica-se um “fit” exponencial do tipo

$$E_0(t) = E_0 e^{-\gamma_F t}, \quad (5.140)$$

à curva obtida numericamente. Este “fit” irá fornecer γ_F , ou seja, a dissipação. Estes resultados obtidos diretamente do “fit” das simulações numéricas servirão de base para comparação dos nossos resultados.

A primeira comparação será com os resultados obtidos para diferentes valores de frequência do sistema. Isto é apresentado na Fig. 5.15.

A Fig. 5.15 mostra que os valores para γ_{SN} , concordam muito bem com os resultados γ_F das simulações numéricas. Na Fig. 5.15(b), observa-se que as duas curvas de queda de energia realmente se superpõem.

Embora a solução apresentada até aqui seja para o banho em um regime caótico,

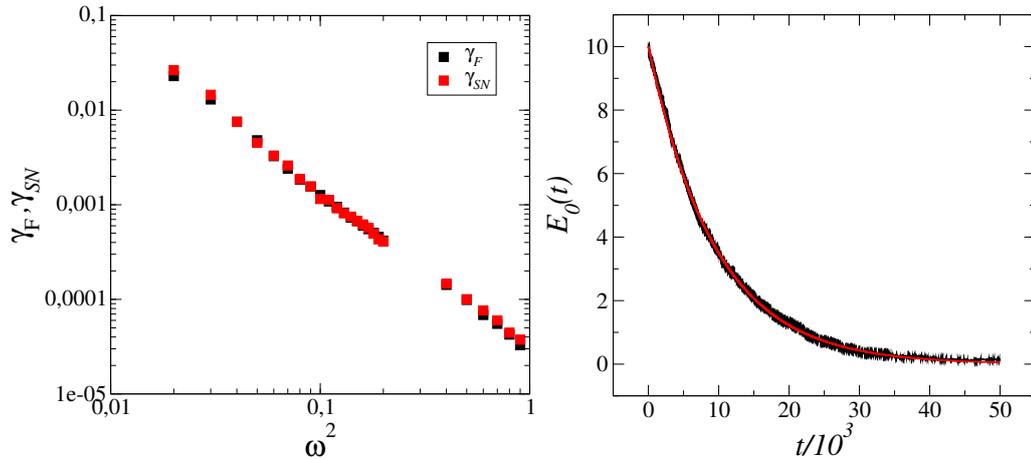


Figura 5.15: (a) γ_{SN} e γ_F como uma função de ω^2 . (b) Simulação numérica para $E_0(t)$ (linha preta) e a função $E_0(t) = E_0 e^{-\gamma_{SN} t}$ (linha vermelha). Ambas as figuras foram obtidas com $N = 2.000$ e $a = 10^{-3}$. Na Fig. (a) uma média sobre 10 realizações foi realizada para evitar flutuações devido a escolha das condições iniciais.

vamos testar seu limite de validade à medida que o sistema muda seu regime dinâmico, passando a apresentar comportamento misto. Obtivemos γ_F para uma série de valores do parâmetro a , os quais foram comparados com γ_{SN} . O resultado está na Fig. 5.16.

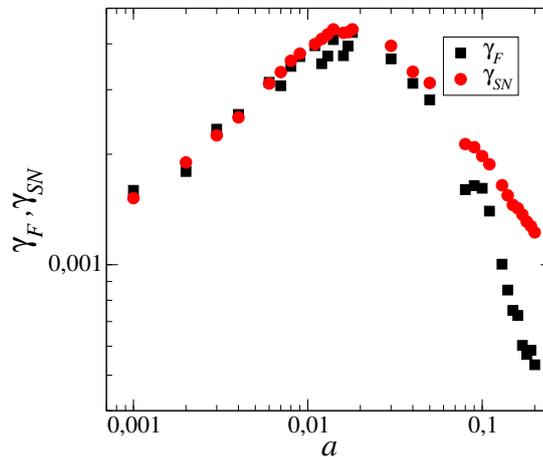


Figura 5.16: γ_{SN} e γ_F como uma função de a . $\omega_0 = 0,3$ e $N = 2.000$.

O que se observa, é que os dados para γ_{SN} concordam bem com os obtidos das simulações numéricas para valores do parâmetro a na região caótica. Quando a torna o sistema misto, ocorre uma discordância entre ambos os resultados, no entanto, qualitativamente o comportamento de ambas as curvas é semelhante.

Agora, tentaremos outra solução para $c_1(t)$, o que chamamos de solução analítica. O

nosso objetivo será obter uma expressão analítica para γ , podendo assim observar a sua dependência com os parâmetros do banho e do sistema. É justamente esta solução que irá permitir a conexão entre os Expoentes de Lyapunov e a dissipação.

5.5.2 A solução “Analítica” para γ

Agora obtemos uma solução analítica para $c_1(t)$. Para isso, partimos da Eq. (5.137)

$$c_1(t) = - \int_0^t ds \alpha(t-s) \cos \omega(t-s), \quad (5.141)$$

e propomos uma função analítica para $\alpha(t-s)$, dada por

$$\alpha(t-s) = \mu e^{-|t-s|/\sigma} \cos[\omega_B(t-s)], \quad (5.142)$$

onde μ , σ e ω_B são três parâmetros. Para mostrar a validade desta consideração, a Fig. 5.17 mostra a função (5.142) e a função $\alpha(t-s)$ obtida pela Eq. (5.58). Isto faz com que nossa solução não seja realmente analítica, pois envolvem parâmetros relacionados com um “fit”.

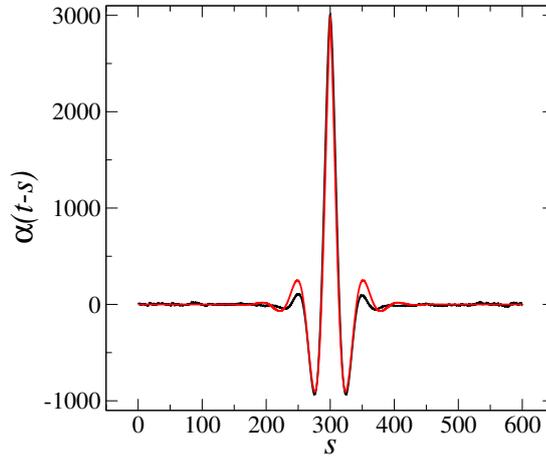


Figura 5.17: Função $\alpha(t-s)$ obtida numericamente (linha preta) e o “fit” (5.142) (linha vermelha). Para os dados numéricos, $N = 100$ e $a = 10^{-3}$. Para o “fit”, $\mu = 3.009$, $\sigma = 21,2496$ e $\omega_B = 0,115$.

Substituindo (5.142) em (5.141),

$$c_1(t) = \mu \int_0^t ds e^{-(t-s)/\sigma} \cos[\omega_B(t-s)] \cos \omega(t-s). \quad (5.143)$$

Usando a relação

$$\cos(\alpha) \cos(\beta) = \frac{1}{2} (\cos(\alpha - \beta) + \cos(\alpha + \beta)), \quad (5.144)$$

escrevemos a Eq. (5.143) como

$$c_1(t) = -\frac{\mu}{2} \left(\int_0^t ds e^{-(t-s)/\sigma} \cos[(\omega_B - \omega)(t-s)] + \int_0^t ds e^{-(t-s)/\sigma} \cos[(\omega_B + \omega)(t-s)] \right). \quad (5.145)$$

Utilizando a mudança de variáveis $u = t - s$, podemos reescrever (5.145) como

$$c_1(t) = -\frac{\mu}{2} \left(\int_0^t du e^{-u/\sigma} \cos[(\omega_B - \omega)u] + \int_0^t du e^{-u/\sigma} \cos[(\omega_B + \omega)u] \right). \quad (5.146)$$

As integrais podem ser resolvidas utilizando o Software Maple, que fornece como resultado

$$c_1(t) = -\frac{\mu}{2\sigma} \left(\frac{1}{\frac{1}{\sigma^2} + (\omega - \omega_B)^2} + \frac{1}{\frac{1}{\sigma^2} + (\omega + \omega_B)^2} \right) + \frac{\mu e^{-\frac{t}{\sigma}}}{2} \left\{ \frac{1}{\frac{1}{\sigma^2} + (\omega - \omega_B)^2} \left(\frac{\cos(\omega - \omega_B)t}{\sigma} - (\omega - \omega_B) \sin(\omega - \omega_B)t \right) + \frac{1}{\frac{1}{\sigma^2} + (\omega + \omega_B)^2} \left(\frac{\cos(\omega + \omega_B)t}{\sigma} - (\omega + \omega_B) \sin(\omega + \omega_B)t \right) \right\}. \quad (5.147)$$

O mesmo procedimento pode ser utilizado para calcular $c_2(t)$, tal que

$$c_2(t) = -\frac{\mu}{2} \left(\frac{(\omega - \omega_B)}{\frac{1}{\sigma^2} + (\omega - \omega_B)^2} + \frac{(\omega + \omega_B)}{\frac{1}{\sigma^2} + (\omega + \omega_B)^2} \right) + \frac{\mu e^{-\frac{t}{\sigma}}}{2} \left\{ \frac{1}{\frac{1}{\sigma^2} + (\omega - \omega_B)^2} \left((\omega - \omega_B) \cos(\omega - \omega_B)t + \frac{\sin(\omega - \omega_B)t}{\sigma} \right) + \frac{1}{\frac{1}{\sigma^2} + (\omega + \omega_B)^2} \left((\omega + \omega_B) \cos(\omega + \omega_B)t + \frac{\sin(\omega + \omega_B)t}{\sigma} \right) \right\}. \quad (5.148)$$

Com a solução (5.147), obtemos a dissipação γ_{SA} ,

$$\begin{aligned} \gamma_{SA} = & -\frac{\lambda_N^2 \mu}{2m\sigma} \left(\frac{1}{\frac{1}{\sigma^2} + (\omega - \omega_B)^2} + \frac{1}{\frac{1}{\sigma^2} + (\omega + \omega_B)^2} \right) + \\ & \frac{\mu e^{-\frac{t}{\sigma}}}{2} \left\{ \frac{1}{\frac{1}{\sigma^2} + (\omega - \omega_B)^2} \left(\frac{\cos(\omega - \omega_B)t}{\sigma} - (\omega - \omega_B) \sin(\omega - \omega_B)t \right) + \right. \\ & \left. \frac{1}{\frac{1}{\sigma^2} + (\omega + \omega_B)^2} \left(\frac{\cos(\omega + \omega_B)t}{\sigma} - (\omega + \omega_B) \sin(\omega + \omega_B)t \right) \right\}. \end{aligned} \quad (5.149)$$

O interessante deste resultado, é que agora a dissipação depende do tempo, segundo e terceiro termo da (5.149). No entanto, esta dependência desaparece rapidamente, uma vez que o termo exponencial vai a zero no mesmo intervalo de tempo em que $\alpha(t-s)$ também vai a zero. Já para tempos longos, a dissipação tende a um valor constante, o qual depende da frequência do sistema através de ω .

O termo temporal na Eq. (5.149), é interpretado como um termo de memória, indicando que para tempos curtos, os efeitos do banho sobre a dinâmica do sistema não são descorrelacionados, mas possuem uma memória. Já o valor de γ_{SA} para tempos longos, possui o mesmo comportamento da Eq. (4.5), com duas diferenças. A primeira delas é que a frequência das órbitas periódicas é trocada por uma única frequência do sistema. A segunda é que a frequência ω_0 , relacionada com a função de correlação de um único elemento do banho, é substituída por uma frequência do banho formado por N elementos.

No caso de banhos caóticos de baixa dimensionalidade, como aqueles discutidos na Cap. 4, $S_x(\omega)$ estava relacionado com uma integral de memória, a qual não pôde ser resolvida devido ao comportamento da função. Aqui, se pensarmos como descrito no final do parágrafo anterior, ela representa diretamente um termo dissipativo, responsável pela dissipação da energia.

Como fizemos para o caso da solução numérica, verificaremos o limite de validade do resultado (5.149). No entanto, este teste será feito para tempos longos, ou seja, quando o termo exponencial não está mais presente e a dissipação é apenas escrita como

$$\gamma_{SA} = -\frac{\lambda_N^2 \mu}{2m\sigma} \left(\frac{1}{\frac{1}{\sigma^2} + (\omega - \omega_B)^2} + \frac{1}{\frac{1}{\sigma^2} + (\omega + \omega_B)^2} \right). \quad (5.150)$$

Primeiramente vamos comparar os resultados obtidos das simulações numéricas, os quais chamamos γ_F , com a Eq. (5.150). Isto é apresentado na Fig. 5.18 para o banho no regime caótico.

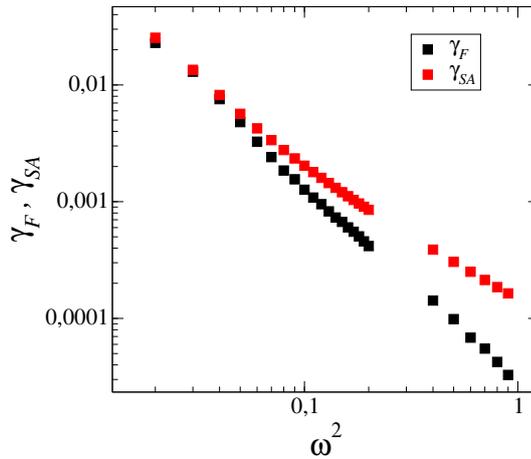


Figura 5.18: γ_{SA} e γ_F como uma função de ω^2 . Os valores de γ_F são os mesmos da Fig. 5.15(a). Para γ_{SA} , $N = 100$, $\mu = 3.009$, $\sigma = 21,2496$ e $\omega_B = 0,115$.

Os resultados da solução analítica não concordam com os valores numéricos para altas frequências, no entanto, o comportamento da curva continua sendo aproximadamente o mesmo. Tal discrepância está relacionada com o erro gerado pelo “fit” (5.142). Quando a frequência é alta, o número de oscilações do sistema enquanto $\alpha(t - s)$ é diferente de zero é muito grande, sendo qualquer detalhe seu muito importante. No entanto, o “fit” não os considera e acaba propagando um erro.

Para verificarmos a validade da Eq. (5.150) quando o regime do banho vai tornando-se misto, utilizamos um valor de frequência para o sistema onde γ_F e γ_{SA} coincidem. Neste caso, escolhemos $\omega_2 = 0,03$. O resultado é apresentado na Fig. 5.19.

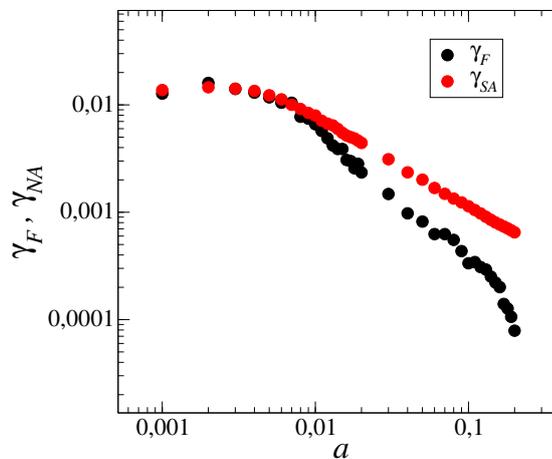


Figura 5.19: γ_{SA} e γ_F como uma função de a . $N = 2.000$.

Para o regime fortemente caótico, $a \rightarrow 0$, os valores para γ_{SA} e γ_F concordam muito bem. Porém, quando o banho vai se tornando misto, isto não ocorre, embora o comportamento qualitativo de ambas as funções seja parecido.

Outro ponto importante que pode ser observado na Fig. 5.19, é que a dissipação não possui o seu maior valor quando o sistema torna-se cada vez mais caótico, mas apresenta um pico. Este pico está associado com a frequência do sistema, em especial onde $\omega \rightarrow \omega_B$, ou seja, quando o sistema entra em ressonância com o banho. Desta forma, apenas o fato de o ambiente tornar-se cada vez mais caótico não é suficiente para aumentar a dissipação.

Baseado no fato de a dissipação apresentar o mesmo comportamento qualitativo dos dados numéricos à medida que o sistema passa a apresentar um regime misto, utilizaremos o resultado (5.150) para relacionar a dissipação com o Expoente de Lyapunov médio do banho, o que é apresentado na Sec. 5.5.3.

5.5.3 Dissipação e o Expoente de Lyapunov do Banho

Agora, vamos relacionar a dissipação com o Expoente de Lyapunov médio do banho. Cada elemento do banho possui quatro Expoentes de Lyapunov, os quais aparecem aos pares [36] e, quando o sistema está em um regime caótico, pelo menos um deles é positivo [36]. O Hamiltoniano (5.5), possui Expoente de Lyapunov positivo para $a \lesssim 0,3$. É justamente para estes valores do parâmetro a que também ocorre a queda exponencial da energia do sistema. Para valores da a onde o regime é misto e o Expoente de Lyapunov é zero, por exemplo $a = 0,5$, o que ocorre é uma leve mudança na energia do sistema, o qual passa a oscilar em torno de um valor constante. Por este motivo, somos levados a pensar que existe uma relação entre os Expoentes de Lyapunov do banho e a dissipação.

O que faremos agora, será escrever a dissipação (5.150) em termos do Expoente de Lyapunov médio do banho. Para isso, partimos da equação para a dissipação,

$$\gamma_{SA} = -\frac{\lambda_N^2 \mu}{2m\sigma} \left(\frac{1}{\frac{1}{\sigma^2} + (\omega - \omega_B)^2} + \frac{1}{\frac{1}{\sigma^2} + (\omega + \omega_B)^2} \right). \quad (5.151)$$

μ , σ e ω_B são parâmetros, obtidos do “fit” da função $\alpha(t - s)$.

A Fig. 5.20 mostra a relação destes parâmetros com o tamanho N do reservatório.

Claramente, σ e ω_B não dependem do tamanho do banho, no entanto, μ apresenta

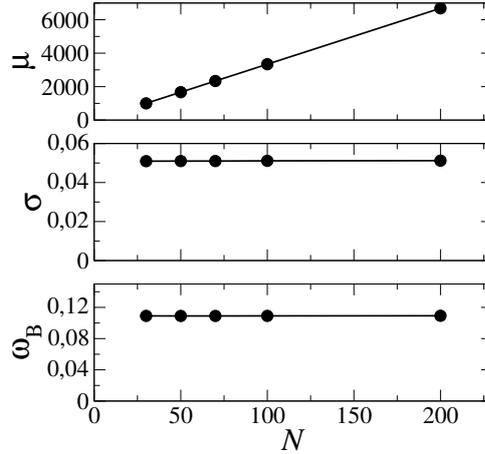


Figura 5.20: μ , σ e ω_B como uma função de N para $a = 10^{-3}$.

uma dependência linear, a qual nos permite escrever

$$\mu = \mu_1 N, \quad (5.152)$$

onde μ_1 é a amplitude da função $\alpha(t-s)$ para $N = 1$. Com isto, reescrevemos a Eq. (5.5.3) como

$$\gamma_{SA} = -\frac{\lambda^2 \mu_1}{2m\sigma} \left(\frac{1}{\frac{1}{\sigma^2} + (\omega - \omega_B)^2} + \frac{1}{\frac{1}{\sigma^2} + (\omega + \omega_B)^2} \right), \quad (5.153)$$

onde usamos $\lambda_N = \lambda/\sqrt{N}$. Agora, a dissipação não depende do tamanho do reservatório, uma vez que nenhum termo depende de N . Isto já era esperado das simulações numéricas.

O próximo passo é escrever os parâmetros μ_1 , σ e ω_B como uma função de a . Para isso, construímos a Fig. 5.21.

Os três parâmetros podem ser descritos como uma lei de potência do parâmetro a ,

$$\mu_1(a) = \rho_\mu a^{-\phi_\mu}, \quad (5.154)$$

$$\sigma(a) = \rho_\sigma a^{-\phi_\sigma}, \quad (5.155)$$

$$\omega_B(a) = \rho_{\omega_B} a^{\phi_{\omega_B}}, \quad (5.156)$$

onde $\rho_\mu = 3.265$, $\phi_\mu = 0.3266$, $\rho_\sigma = 3.670$, $\phi_\sigma = 0.2326$, $\rho_{\omega_B} = 0.6485$ e $\phi_{\omega_B} = 0.2612$.

Substituindo as Eqs. (5.154)-(5.156) na Eq. (5.153), obtemos a dissipação como uma

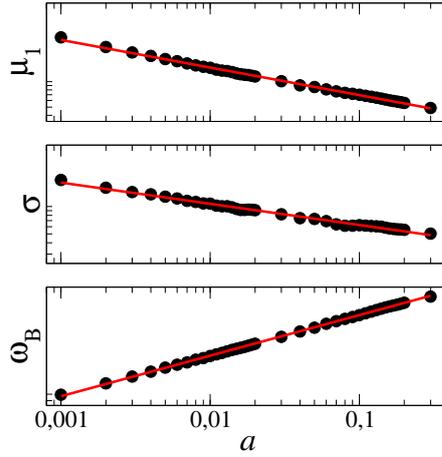


Figura 5.21: μ , σ e ω_B como uma função do parâmetro a (círculos pretos) e “fit” utilizando uma lei de potência (linha vermelha)

função do parâmetro de caoticidade a ,

$$\gamma_{SA}(a) = -\frac{\lambda^2 \rho_\mu}{2m\rho_\sigma a^{(\phi_\mu - \phi_\sigma)}} \left(\frac{1}{\frac{a^{2\phi_\sigma}}{\rho_\sigma^2} + (\omega - \rho_{\omega_B} a^{\phi_{\omega_B}})^2} + \frac{1}{\frac{a^{2\phi_\sigma}}{\rho_\sigma^2} + (\omega + \rho_{\omega_B} a^{\phi_{\omega_B}})^2} \right). \quad (5.157)$$

Para escrever a dissipação em termos do Exponente de Lyapunov médio do banho, precisamos da relação deste com o parâmetro a . Para isto, utilizamos a Fig. 5.22.

Dividindo a Fig. 5.22 em quatro regiões, podemos utilizar o “fit”

$$\langle \Lambda \rangle = \begin{cases} \xi_1 - \eta_1 a^{\delta_1}, & \mathbf{R}_1 : 10^{-3} < a \leq 0.007 \\ \xi_2 - \eta_2 a^{\delta_2}, & \mathbf{R}_2 : 0.007 < a \leq 0.11 \\ \xi_3 - \eta_3 a^{\delta_3}, & \mathbf{R}_3 : 0.11 < a \leq 0.27 \\ \eta_4 e^{\delta_4 a}, & \mathbf{R}_4 : 0.27 < a \leq 0.32, \end{cases} \quad (5.158)$$

onde $\xi_1 = 0$, $\eta_1 = -0.2982$, $\delta_1 = 0.007734$, $\xi_2 = 0.2924$, $\eta_2 = 0.7516$, $\delta_2 = 1$, $\xi_3 = 0.3514$, $\eta_3 = 0.1265$, $\delta_3 = 1$, $\eta_4 = 2.08838 \times 10^{12}$ e $\delta_4 = 122.4$, e assim obter $\langle \Lambda \rangle (a)$.

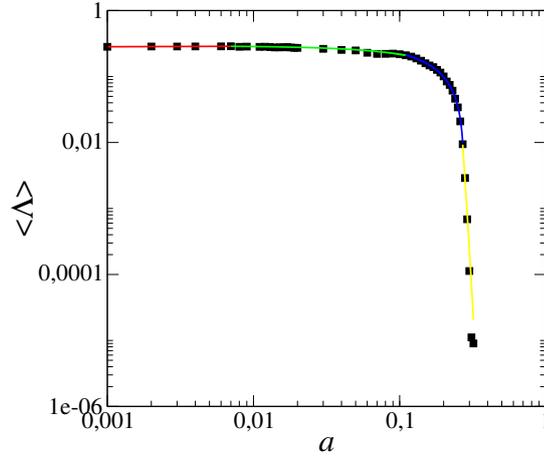


Figura 5.22: Expoente de Lyapunov médio como uma função do parâmetro a , para $0 < a < 0,32$. Neste caso, foi utilizada a distribuição Pseudo-Canônica para as energias do oscilador quártico com $\bar{E}_{OQ} = 0,1$. As linhas contínuas representam o “fit” para $\langle \Lambda \rangle \times a$ dado pela Eq. (5.158). \mathbf{R}_1 é representado pela vermelha, \mathbf{R}_2 pela linha verde, \mathbf{R}_3 pela linha azul e \mathbf{R}_4 pela linha amarela.

Substituindo a Eq. (5.158) em (5.157), obtemos $\gamma_{SA}(\langle \Lambda \rangle)$,

$$\gamma_{SA}^{(i)}(\langle \Lambda \rangle) = -\frac{\lambda^2 \rho_\mu}{2m^2 \rho_\sigma} \left(\frac{1}{B_i} \right)^{\left(\frac{\phi_\mu - \phi_\sigma}{\delta_i} \right)} \times \left\{ \frac{1}{\left[\frac{1}{\rho_\sigma^2} (B_i)^{\frac{2\phi_\sigma}{\delta_i}} + \left[\omega - \rho_{\omega_B} (B_i)^{\frac{\phi_{\omega_B}}{\delta_i}} \right]^2 \right]^2} + \frac{1}{\left[\frac{1}{\rho_\sigma^2} (B_i)^{\frac{2\phi_\sigma}{\delta_i}} + \left[\omega + \rho_{\omega_B} (B_i)^{\frac{\phi_{\omega_B}}{\delta_i}} \right]^2 \right]^2} \right\}, \quad (5.159)$$

onde $B_i = (\xi_i - \langle \Lambda \rangle) / \eta_i$ e $i = 1, 2, 3$. Para o último regime \mathbf{R}_4 ,

$$\gamma_{SA}^{(4)}(\langle \Lambda \rangle) = -\frac{\lambda^2 \rho_\mu}{2m^2 \rho_\sigma} \left(\frac{\delta_4}{A_4} \right)^{(\phi_\mu - \phi_\sigma)} \left\{ \frac{1}{\left[\frac{1}{\rho_\sigma^2} \left(\frac{A_4}{\delta_4} \right)^{2\phi_\sigma} + \left[\omega - \frac{\rho_{\omega_B}}{\delta_4^{\phi_{\omega_B}}} (A_4)^{\phi_{\omega_B}} \right]^2 \right]^2} + \frac{1}{\left[\frac{1}{\rho_\sigma^2} \left(\frac{A_4}{\delta_4} \right)^{2\phi_\sigma} + \left[\omega + \frac{\rho_{\omega_B}}{\delta_4^{\phi_{\omega_B}}} (A_4)^{\phi_{\omega_B}} \right]^2 \right]^2} \right\}, \quad (5.160)$$

com $A_4 = \ln(\eta_4/\langle\Lambda\rangle)$.

Se tomarmos o limite $\langle\Lambda\rangle \rightarrow 0$, também $\gamma_{SA} \rightarrow 0$. No entanto, quando a dinâmica do sistema é predominantemente caótica, com pelo menos um Expoente de Lyapunov maior do que zero, o termo de dissipação não desaparece.

Este também é um dos grandes resultados deste trabalho. A solução analítica nos permitiu obter esta relação, mostrando que realmente o caos, caracterizado por pelo menos um Expoente de Lyapunov maior do que zero, é fundamental para promover efeitos dissipativos na dinâmica do sistema [62].

Por fim, a Fig. 5.23 mostra γ_{SA} e γ_F como uma função do Lyapunov médio do banho.

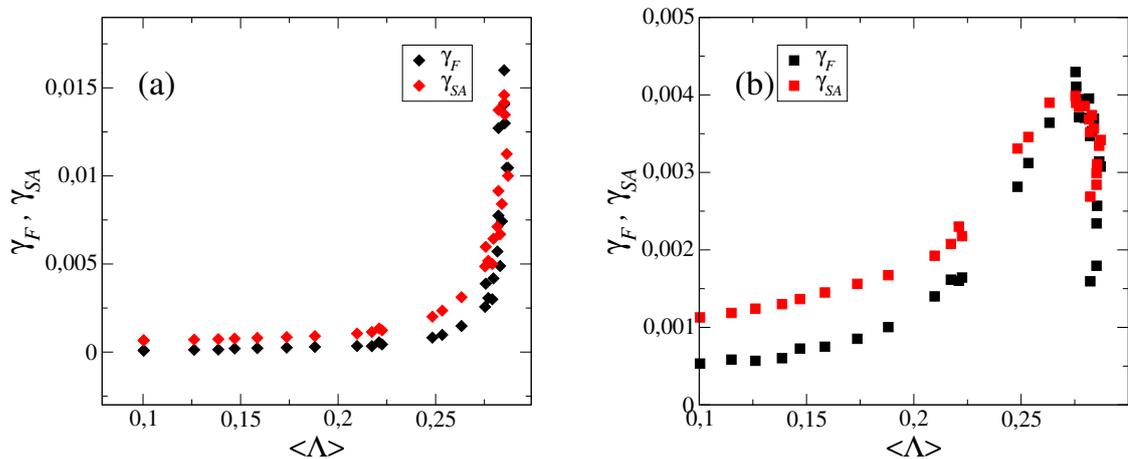


Figura 5.23: γ_{SA} e γ_F como uma função de $\langle\Lambda\rangle$ para $N = 2.000$. (a) $\omega^2 = 0,03$ e (b) $\omega^2 = 0,09$.

A Fig 5.23 mostra claramente a dissipação indo a zero à medida que $\langle\Lambda\rangle$ também vai a zero. Porém, um pico ocorre novamente na região a direita, justamente onde a frequência do sistema é próxima da frequência do banho. Isto indica que não somente o Lyapunov é fundamental em tornar o ambiente mais efetivo na promoção de efeitos dissipativos, mas também a relação entre as frequências do banho e do sistema.

Com a Eq. (5.160) e a Fig. 5.23, fechamos os resultados desta tese, onde discutimos desde as propriedades do modelo utilizado, a dinâmica do sistema caótico utilizado como elemento do banho, obtivemos uma solução numérica e analítica para os efeitos dissipativos e os relacionamos com o Expoente de Lyapunov médio do banho. Por fim, no Cap. 6, apresentamos as conclusões deste trabalho.

Conclusões

Quando um sistema de interesse (sistema) interage com um sistema caótico de baixa dimensionalidade ($N = 2$ por exemplo) representando um ambiente, o que se observa é um fluxo de energia do sistema para o ambiente. No entanto, para tempos longos, embora o reservatório não “devolva” a energia para o sistema, sistema e ambiente não apresentam uma distribuição de energias do tipo Boltzmann. Porém, quando o número de elementos caóticos no banho aumenta, sistema e ambiente realmente termalizam, sendo possível definir uma temperatura para ambos em termos da energia média de equilíbrio. Outro fator interessante quando o tamanho do banho aumenta, é que todos os processos dissipativos passam a ocorrer para apenas uma realização, não sendo necessário médias de ensemble como no caso em que a dimensão do sistema é baixa.

Baseado nisto, estudamos o comportamento de um sistema, representado por um oscilador harmônico unidimensional, que é acoplado a um banho com N osciladores quárticos. Com isso, mostramos que a dinâmica do sistema depende de ambos, do número de elementos, ou tamanho, do ambiente e do seu movimento. Quando os osciladores estão em um regime cuja dinâmica é mista ou regular, o que se observa é que a energia do sistema sofre uma pequena queda e passa a oscilar em torno de um valor levemente menor que sua energia inicial. Isto ocorre independentemente do tamanho do banho. No entanto, quando os osciladores quárticos apresentam dinâmica predominantemente caótica, o que se tem é um fluxo da energia do sistema para o ambiente, porém o comportamento desta curva no tempo depende do número de elementos no banho. Para valores pequenos de N , $N \lesssim 20$, as curvas da energia apresentam muitas oscilações, que acabam desaparecendo à medida que o número de elementos no banho aumenta $N \gtrsim 100$. Além da suavização das oscilações, a curva da energia cada vez mais tende a uma função exponencial, tornando-se

independente de N para $N \gtrsim 1000$.

Baseado nesta ideia e utilizando a Teoria da Resposta Linear, escrevemos uma equação para o movimento do sistema, de tal forma que sua dinâmica passa a ser descrita como um oscilador harmônico amortecido, onde o termo de atrito é proporcional à velocidade. Este resultado produz uma mudança na frequência do sistema e apresenta a dissipação na forma de uma integral, a qual envolve a frequência do sistema e os parâmetros do banho.

A solução da integral fornece um resultado constante, mais uma parte dependente do tempo, que é interpretada como um termo de memória, ou seja, carrega as informações de eventos ocorridos em instantes de tempo anteriores. Para tempos longos, o termo de memória vai a zero e a dinâmica do sistema é descrita com um valor constante para a dissipação.

Por fim, a dissipação é escrita como uma função do Expoente de Lyapunov médio do banho, sendo possível observar, para o nosso problema, que somente ocorre dissipação quando o banho é predominantemente caótico, ou seja, apresenta pelo menos um Expoente de Lyapunov maior do que zero. No entanto, a dissipação não é maior apenas pelo fato de o banho tornar-se cada vez mais caótico, isto é, aumentar cada vez mais o Expoente de Lyapunov, mas também depende da frequência do oscilador, apresentando um pico quando $\omega \rightarrow \omega_B$.

O que fizemos neste trabalho, foi considerar que a energia do sistema de interesse sempre é descrita por uma função exponencial, inclusive nas regiões em que o banho encontra-se em um regime misto. Porém, nas regiões mistas, efeitos que não estão presentes no regime caótico, como por exemplo efeitos de “stickiness”, passam a influenciar diretamente a dinâmica do sistema. Como uma consequência, a energia do sistema não apresenta mais um comportamento exponencial, passando a ser descrita por uma lei de potência. Além da energia, a função $\alpha(t-s)$, que é uma soma de funções de correlação dos elementos do banho, também pode ser ajustada com outra função, fornecendo outro comportamento para a dissipação. Neste contexto, nossa proposta futura é estudar os efeitos de banhos mistos sobre a dinâmica do sistema de interesse, para isso utilizando leis de potência no lugar de funções exponenciais. A escolha destas funções está baseada no fato de que, para sistemas apresentando regime misto, suas funções de correlação apresentam um comportamento descrito por leis de potência [63], o que acreditamos irá influenciar diretamente a função $\alpha(t-s)$ e consequentemente a dissipação.

Equação Generalizada de Langevin

Para chegar na Eq. (3.29), seguimos os passos propostos por [7]. Assim, primeiramente deriva-se a Eq. (3.26a) em relação ao tempo e substituímos \dot{p}_ν pela Eq. (3.26b):

$$\ddot{q}_\nu + \omega_\nu^2 q_\nu = \frac{\lambda Q \Gamma_\nu(\mathbf{q})}{m_\nu}. \quad (\text{A.1})$$

Resolve-se a Eq. (A.1) considerando o método da variação de parâmetros [64]. A parte homogênea trata-se do oscilador harmônico simples, cuja solução é:

$$q_\nu = a \cos(\omega_\nu t) + b \sin(\omega_\nu t). \quad (\text{A.2})$$

O método da variação de parâmetros sugere substituir as constantes a e b por funções $a(t)$ e $b(t)$, tal que a Eq. (A.2) torna-se

$$q_\nu = a(t) \cos(\omega_\nu t) + b(t) \sin(\omega_\nu t). \quad (\text{A.3})$$

Derivando a Eq. (A.3) em relação ao tempo:

$$\dot{q}_\nu = \dot{a}(t) \cos(\omega_\nu t) + \dot{b}(t) \sin(\omega_\nu t) - a(t) \omega_\nu \sin(\omega_\nu t) + b(t) \omega_\nu \cos(\omega_\nu t), \quad (\text{A.4})$$

de forma que, segundo [64],

$$\dot{a}(t) \cos(\omega_\nu t) + \dot{b}(t) \sin(\omega_\nu t) = 0. \quad (\text{A.5})$$

Derivando agora a Eq. (A.4) em relação ao tempo:

$$\ddot{q}_\nu = -\dot{a}(t)\omega_\nu \sin(\omega_\nu t) + \dot{b}(t)\omega_\nu \cos(\omega_\nu t) - a(t)\omega_\nu^2 \cos(\omega_\nu t) - b(t)\omega_\nu^2 \sin(\omega_\nu t). \quad (\text{A.6})$$

Substituindo na Eq. (A.1), obtem-se:

$$-\dot{a}(t)\omega_\nu \sin(\omega_\nu t) + \dot{b}(t)\omega_\nu \cos(\omega_\nu t) = \frac{\lambda Q \Gamma_\nu(\mathbf{q})}{m_\nu}. \quad (\text{A.7})$$

Tem-se um conjunto de duas equações envolvendo $\dot{a}(t)$ e $\dot{b}(t)$:

$$\begin{cases} \dot{a}(t) \cos(\omega_\nu t) + \dot{b}(t) \sin(\omega_\nu t) = 0 \\ -\dot{a}(t)\omega_\nu \sin(\omega_\nu t) + \dot{b}(t)\omega_\nu \cos(\omega_\nu t) = \frac{\lambda Q \Gamma_\nu(\mathbf{q})}{m_\nu}, \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

que pode ser resolvido usando a regra de Kramer [65]: Seja o sistema

$$\begin{aligned} ax + by &= e \\ cx + dy &= f, \end{aligned}$$

Pela regra de Kramer, ele tem como solução:

$$x = \frac{ed - bf}{ad - bc} \quad y = \frac{af - ec}{ad - bc} \quad (\text{A.9})$$

Aplicando Eq. (A.9) a Eq. (A.8), temos:

$$\dot{a}(t) = -\sin(\omega_\nu t) \frac{\lambda Q \Gamma_\nu(\mathbf{q})}{m_\nu \omega_\nu}, \quad (\text{A.10})$$

$$\dot{b}(t) = \cos(\omega_\nu t) \frac{\lambda Q \Gamma_\nu(\mathbf{q})}{m_\nu \omega_\nu}. \quad (\text{A.11})$$

Integrando em t gera os coeficientes que fazem parte da solução da Eq. (A.1):

$$a(t) = -\int_0^t \sin(\omega_\nu \tau) \frac{\lambda Q(\tau) \Gamma_\nu[\mathbf{q}(\tau)]}{m_\nu \omega_\nu} d\tau + q_\nu(0), \quad (\text{A.12a})$$

$$b(t) = \int_0^t \cos(\omega_\nu \tau) \frac{\lambda Q(\tau) \Gamma_\nu[\mathbf{q}(\tau)]}{m_\nu \omega_\nu} d\tau + \frac{p_\nu(0)}{m_\nu \omega_\nu}, \quad (\text{A.12b})$$

onde $q(0)$ e $p(0)/m_\nu \omega_\nu$ aparecem das condições de contorno.

Substituindo as Eqs. (A.12a) e (A.12b) na Eq. (A.2), tem-se a solução da equação

diferencial:

$$\begin{aligned}
q_\nu(t) &= q_\nu(0) \cos(\omega_\nu t) + \frac{p_\nu(0)}{m_\nu \omega_\nu} \sin(\omega_\nu t) \\
&\quad - \int_0^t \sin(\omega_\nu \tau) \cos(\omega_\nu t) \frac{\lambda Q(\tau) \Gamma_\nu[\mathbf{q}(\tau)]}{m_\nu \omega_\nu} d\tau \\
&\quad + \int_0^t \cos(\omega_\nu \tau) \sin(\omega_\nu t) \frac{\lambda Q(\tau) \Gamma_\nu[\mathbf{q}(\tau)]}{m_\nu \omega_\nu} d\tau,
\end{aligned} \tag{A.13}$$

que ainda pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned}
q_\nu(t) &= q_\nu(0) \cos(\omega_\nu t) + \frac{p_\nu(0)}{m_\nu \omega_\nu} \sin(\omega_\nu t) \\
&\quad + \lambda \int_0^t d\tau \frac{\sin[\omega_\nu(t - \tau)]}{m_\nu \omega_\nu} Q(\tau) \Gamma_\nu[\mathbf{q}(\tau)],
\end{aligned} \tag{A.14}$$

com $p_\nu = m_\nu \dot{q}_\nu$. Integrando a Eq. (A.14) por partes [61]:

$$u = Q(\tau), \tag{A.15a}$$

$$dv = \frac{\sin[\omega_\nu(t - \tau)]}{m_\nu \omega_\nu} \Gamma_\nu[\mathbf{q}(\tau)] d\tau, \tag{A.15b}$$

$$v = \int_{\tau_1}^{\tau} \frac{\sin[\omega_\nu(t - \tau')]}{m_\nu \omega_\nu} \Gamma_\nu[\mathbf{q}(\tau')] d\tau' \equiv D_\nu(\mathbf{q}; t, \tau), \tag{A.15c}$$

$$\begin{aligned}
q_\nu(t) &= q_\nu(0) \cos(\omega_\nu t) + \frac{p_\nu(0)}{m_\nu \omega_\nu} \sin(\omega_\nu t) \\
&\quad + \lambda Q(\tau) D_\nu(\mathbf{q}; t, \tau) \Big|_0^t - \lambda \int_0^t D_\nu(\mathbf{q}; t, \tau) \dot{Q}(\tau) d\tau,
\end{aligned} \tag{A.15d}$$

$$\begin{aligned}
q_\nu(t) &= q_\nu(0) \cos(\omega_\nu t) + \frac{p_\nu(0)}{m_\nu \omega_\nu} \sin(\omega_\nu t) \\
&\quad + \lambda Q(t) D_\nu(\mathbf{q}; t, t) - \lambda Q(0) D_\nu(\mathbf{q}; t, 0) - \lambda \int_0^t D_\nu(\mathbf{q}; t, \tau) \dot{Q}(\tau) d\tau,
\end{aligned} \tag{A.15e}$$

$$\begin{aligned}
q_\nu(t) &- \lambda Q(t) D_\nu(\mathbf{q}; t, t) = q_\nu(0) \cos(\omega_\nu t) + \frac{p_\nu(0)}{m_\nu \omega_\nu} \sin(\omega_\nu t) \\
&- \lambda Q(0) D_\nu(\mathbf{q}; t, 0) - \lambda \int_0^t D_\nu(\mathbf{q}; t, \tau) \dot{Q}(\tau) d\tau.
\end{aligned} \tag{A.15f}$$

Para um acoplamento bilinear do sistema-banho, Γ_ν é independente de \mathbf{q} e Eq. (A.15f) possui uma solução explícita.

O acoplamento bilinear entre o sistema e o banho térmico é

$$\mathbf{\Gamma}(\mathbf{q}) = \sum_\nu \Gamma_\nu q_\nu, \tag{A.16}$$

onde cada Γ_ν é uma constante e dado por (3.27). Considerando este acoplamento, a

Eq. (A.15c) dá:

$$D_\nu(\mathbf{q}; t, \tau) = \int_{\tau_1}^{\tau} \frac{\sin[\omega_\nu(t - \tau')]}{m_\nu \omega_\nu} \Gamma_\nu[\mathbf{q}(\tau')] d\tau', \quad (\text{A.17})$$

$$D_\nu(\mathbf{q}; t, \tau) = \int_{\tau_1}^{\tau} \frac{\sin[\omega_\nu(t - \tau')]}{m_\nu \omega_\nu} \Gamma_\nu d\tau', \quad (\text{A.18})$$

$$D_\nu(\mathbf{q}; t, \tau) = \frac{\Gamma_\nu}{m_\nu \omega_\nu^2} \cos[\omega_\nu(t - \tau)], \quad (\text{A.19})$$

onde considera-se $D_\nu(\mathbf{q}; t, \tau_1) = 0$. Substituindo este resultado na Eq. (A.15f):

$$\begin{aligned} q_\nu(t) - \frac{\lambda Q(t) \Gamma_\nu}{m_\nu \omega_\nu^2} &= q_\nu(0) \cos(\omega_\nu t) + \frac{p_\nu(0)}{m_\nu \omega_\nu} \sin(\omega_\nu t) - \frac{\lambda Q(0) \Gamma_\nu}{m_\nu \omega_\nu^2} \cos(\omega_\nu t) \\ &\quad - \lambda \int_0^t \frac{\Gamma_\nu}{m_\nu \omega_\nu^2} \cos[\omega_\nu(t - \tau)] \dot{Q}(\tau) d\tau, \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

$$\begin{aligned} q_\nu(t) - \frac{\lambda Q(t) \Gamma_\nu}{m_\nu \omega_\nu^2} &= \left[q_\nu(0) - \frac{\lambda Q(0) \Gamma_\nu}{m_\nu \omega_\nu^2} \right] \cos(\omega_\nu t) \\ &\quad + \frac{p_\nu(0)}{m_\nu \omega_\nu} \sin(\omega_\nu t) - \frac{\lambda \Gamma_\nu}{m_\nu \omega_\nu^2} \int_0^t \cos[\omega_\nu(t - \tau)] \dot{Q}(\tau) d\tau \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

que utilizando a Eq. (3.25a) ainda pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} q_\nu(t) - \frac{\lambda Q(t) \Gamma_\nu}{m_\nu \omega_\nu^2} &= \left[q_\nu(0) - \frac{\lambda Q(0) \Gamma_\nu}{m_\nu \omega_\nu^2} \right] \cos(\omega_\nu t) \\ &\quad + \frac{p_\nu(0)}{m_\nu \omega_\nu} \sin(\omega_\nu t) - \frac{\lambda \Gamma_\nu}{m_\nu \omega_\nu^2} \int_0^t \cos[\omega_\nu(t - \tau)] P(\tau) d\tau. \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Substituindo esta equação na Eq. (A.16) e posteriormente na Eq. (3.25), temos a equação para o sistema:

$$\dot{P}(t) + \frac{\partial H_S^{(m)}}{\partial Q} + \lambda^2 \int_0^t d\tau K(t - \tau) P(\tau) = \lambda F(t). \quad (\text{A.23})$$

Se o banho alcançou o equilíbrio em $t = 0$ na ausência do sistema de interesse, conforme mencionado na Sec. 3.2, calculamos $\langle F(t) \rangle$. Para isto, a função distribuição do banho é:

$$P[\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0)] = Z^{-1} e^{H_B/kT}, \quad (\text{A.24})$$

onde Z é a função partição [48] e H_B é dado pela Eq. (3.24).

Calcula-se o valor médio de $F(t)$ utilizando as equações do ensemble canônico:

$$\langle F(t) \rangle = \int F(t)P(q,p)dqdp, \quad (\text{A.25})$$

$$F(t) = \sum_{\nu} \Gamma_{\nu} \left\{ \left[q_{\nu}(0) - \frac{\lambda \Gamma_{\nu}}{m_{\nu} \omega_{\nu}^2} Q(0) \right] \cos(\omega_{\nu} t) + \frac{p_{\nu}(0)}{m_{\nu} \omega_{\nu}} \sin(\omega_{\nu} t) \right\}, \quad (\text{A.26})$$

$$P(q,p) = Z^{-1} e^{-H_B/kT}, \quad (\text{A.27})$$

$$H_B = \sum_{\nu} \left(\frac{p_{\nu}^2}{2m_{\nu}} + \frac{m_{\nu} \omega_{\nu}^2 q_{\nu}^2}{2} \right), \quad (\text{A.28})$$

$$Z = \int \exp\{-\beta H_B(q,p)\} dqdp. \quad (\text{A.29})$$

Calculamos primeiro a função de partição:

$$Z = \int \dots \int \exp \left[-\beta \sum_{\nu} \left(\frac{p_{\nu}^2}{2m_{\nu}} + \frac{m_{\nu} \omega_{\nu}^2 q_{\nu}^2}{2} \right) \right] dq_1 dp_1 \dots dq_{\nu} dp_{\nu}, \quad (\text{A.30})$$

$$\begin{aligned} Z &= \int \exp \left[-\beta \left(\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{m_1 \omega_1^2 q_1^2}{2} \right) \right] dq_1 dp_1 \dots \\ &\dots \int \exp \left[-\beta \left(\frac{p_{\nu}^2}{2m_{\nu}} + \frac{m_{\nu} \omega_{\nu}^2 q_{\nu}^2}{2} \right) \right] dq_{\nu} dp_{\nu}, \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

$$\begin{aligned} Z &= \int \exp \left(-\beta \frac{p_1^2}{2m_1} \right) dp_1 \int \exp \left(-\beta \frac{m_1 \omega_1^2 q_1^2}{2} \right) dq_1 \dots \\ &\dots \int \exp \left(-\beta \frac{p_{\nu}^2}{2m_{\nu}} \right) dp_{\nu} \int \exp \left(-\beta \frac{m_{\nu} \omega_{\nu}^2 q_{\nu}^2}{2} \right) dq_{\nu}. \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

Agora utilizamos a integral [66]:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp -(ax^2 + bx + c) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp [(b^2 - 4ac)/4a] \quad (\text{A.33})$$

e obtemos o valor da função de partição:

$$Z = \sqrt{\frac{2m_1\pi}{\beta}} \sqrt{\frac{2\pi}{m_1\omega_1^2\beta}} \dots \sqrt{\frac{2m_{\nu}\pi}{\beta}} \sqrt{\frac{2\pi}{m_{\nu}\omega_{\nu}^2\beta}}, \quad (\text{A.34})$$

$$Z = \prod_{\nu} \frac{2\pi}{\beta\omega_{\nu}}. \quad (\text{A.35})$$

Munidos com a função de partição, calculamos $\langle F(t) \rangle$:

$$\langle F(t) \rangle = \int F(t) P[q(0), p(0)] dq(0) dp(0), \quad (\text{A.36})$$

$$\langle F(t) \rangle = \int \frac{F(t) \exp\left(-\beta \sum_{\nu} \frac{p_{\nu}^2}{2m_{\nu}} + \frac{m_{\nu} \omega_{\nu}^2 q_{\nu}^2}{2}\right)}{\prod_{\nu} \frac{2\pi}{\beta \omega_{\nu}}} dq_1 dp_1 \dots dq_{\nu} dp_{\nu}, \quad (\text{A.37})$$

$$\langle F(t) \rangle = \int \frac{(f_1 + \dots + f_{\nu}) \exp\left(-\beta \sum_{\nu} \frac{p_{\nu}^2}{2m_{\nu}} + \frac{m_{\nu} \omega_{\nu}^2 q_{\nu}^2}{2}\right)}{\prod_{\nu} \frac{2\pi}{\beta \omega_{\nu}}} dq_1 dp_1 \dots dq_{\nu} dp_{\nu}, \quad (\text{A.38})$$

onde

$$\begin{aligned} f_1 &= \Gamma_1 \left\{ \left[q_1(0) - \frac{\lambda \Gamma_1}{m_1 \omega_1^2} Q(0) \right] \cos(\omega_1 t) + \frac{p_1(0)}{m_1 \omega_1} \sin(\omega_1 t) \right\}, \\ &\vdots \\ f_{\nu} &= \Gamma_{\nu} \left\{ \left[q_{\nu}(0) - \frac{\lambda \Gamma_{\nu}}{m_{\nu} \omega_{\nu}^2} Q(0) \right] \cos(\omega_{\nu} t) + \frac{p_{\nu}(0)}{m_{\nu} \omega_{\nu}} \sin(\omega_{\nu} t) \right\}. \end{aligned}$$

Assim:

$$\begin{aligned} \langle F(t) \rangle &= \prod_{\nu} \frac{\beta \omega_{\nu}}{2\pi} \int f_1 \exp(-\beta H_B) dq_1(0) dp_1(0) \dots dq_{\nu}(0) dp_{\nu}(0) + \dots \\ &\dots + \prod_{\nu} \frac{\beta \omega_{\nu}}{2\pi} \int f_{\nu} \exp(-\beta H_B) dq_1(0) dp_1(0) dq_{\nu}(0) \dots dp_{\nu}(0). \end{aligned} \quad (\text{A.39})$$

Resolvemos cada uma das integrais separadamente, utilizando como referência a primeira delas:

$$\begin{aligned} &\int f_1 \exp(-\beta H_B) dq_1 dp_1 \dots dq_{\nu} dp_{\nu} = \\ &\int \Gamma_1 q_1(0) \cos(\omega_1 t) \exp(-\beta H_B) dq_1(0) dp_1(0) \dots dq_{\nu}(0) dp_{\nu}(0) \\ &- \int \frac{\lambda \Gamma_1^2}{m_1 \omega_1^2} Q(0) \cos(\omega_1 t) \exp(-\beta H_B) dq_1(0) dp_1(0) \dots dq_{\nu}(0) dp_{\nu}(0) \\ &+ \int \frac{p_1(0)}{m_1 \omega_1} \sin(\omega_1 t) \exp(-\beta H_B) dq_1(0) dp_1(0) \dots dq_{\nu}(0) dp_{\nu}(0), \end{aligned} \quad (\text{A.40})$$

onde a partir de agora suprimimos o zero das variáveis q e p . A parte do meio é a mesma integral calculada para a função de partição (A.35). A primeira e última parte da Eq. (A.40) são calculadas da mesma forma, a menos de uma constante. Calculamos a

primeira parte:

$$\int \Gamma_1 q_1 \cos(\omega_1 t) \exp(-\beta H_B) dq_1 dp_1 = \Gamma_1 \cos(\omega_1 t) \times \int_{-\infty}^{+\infty} q_1 \exp\left(-\beta \sum_{\nu} \frac{p_{\nu}^2}{2m_{\nu}} + \frac{m_{\nu} \omega_{\nu}^2 q_{\nu}^2}{2}\right) dq_1 dp_1, \quad (\text{A.41})$$

$$\int \Gamma_1 q_1 \cos(\omega_1 t) \exp(-\beta H_B) dq_1 dp_1 = \Gamma_1 \cos(\omega_1 t) \exp\left(-\beta \sum_{\nu \neq 1} \frac{p_{\nu}^2}{2m_{\nu}} + \frac{m_{\nu} \omega_{\nu}^2 q_{\nu}^2}{2}\right) \times \int_{-\infty}^{+\infty} q_1 \exp\left[-\beta \left(\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{m_1 \omega_1^2 q_1^2}{2}\right)\right] dq_1 dp_1, \quad (\text{A.42})$$

$$\int \Gamma_1 q_1 \cos(\omega_1 t) \exp(-\beta H_B) dq_1 dp_1 = \Gamma_1 \cos(\omega_1 t) \exp\left(-\beta \sum_{\nu \neq 1} \frac{p_{\nu}^2}{2m_{\nu}} + \frac{m_{\nu} \omega_{\nu}^2 q_{\nu}^2}{2}\right) \times \int_{-\infty}^{+\infty} q_1 \exp\left(\frac{-\beta m_1 \omega_1^2 q_1^2}{2}\right) dq_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{-\beta p_1^2}{2m_1}\right) dp_1. \quad (\text{A.43})$$

Sendo

$$\int_{-\infty}^{+\infty} q_1 \exp\left(\frac{-\beta m_1 \omega_1^2 q_1^2}{2}\right) dq_1 = 0, \quad (\text{A.44})$$

temos que

$$\int \Gamma_1 q_1 \cos(\omega_1 t) \exp(-\beta H_B) dq_1 dp_1 \dots dq_{\nu} dp_{\nu} = 0. \quad (\text{A.45})$$

Assim,

$$\int f_1 \exp(-\beta H_B) dq_1 dp_1 dq_{\nu} dp_{\nu} = -\frac{\lambda \Gamma_1^2}{m_1 \omega_1^2} Q(0) \cos(\omega_1 t) \prod_{\nu} \frac{2\pi}{\beta \omega_{\nu}}, \quad (\text{A.46})$$

de forma que a Eq. (A.40) torna-se:

$$\langle F(t) \rangle = -\lambda \sum_{\nu} \frac{\Gamma_{\nu}^2}{m_{\nu} \omega_{\nu}^2} Q(0) \cos(\omega_{\nu} t), \quad (\text{A.47})$$

$$\langle F(t) \rangle = -\lambda K(t) Q(0). \quad (\text{A.48})$$

Considerando-se o banho equilibrado em $t = 0$ na presença do sistema, a distribuição apropriada de estados iniciais é governada pelo Hamiltoniano do banho modificado, Eqs. (3.37) e (3.38).

Desta forma, é possível mostrar que $\langle F(t) \rangle = 0$. Para isto fazemos:

$$\langle F(t) \rangle = \int F(t) P[\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0)] d\mathbf{q}(0) d\mathbf{p}(0), \quad (\text{A.49})$$

onde $P[\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0)]$ é dado pela Eq. (3.37) e $F(t)$ pela (3.31). Calculamos primeiramente a função partição:

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\beta H_B^{(m)}\right), \quad (\text{A.50})$$

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\beta \sum_{\nu} \left[\frac{p_{\nu}^2}{2m_{\nu}} + \frac{m_{\nu}\omega_{\nu}^2}{2} \left(q_{\nu} - \lambda \frac{\Gamma_{\nu} Q}{m_{\nu}\omega_{\nu}^2} \right)^2 \right]\right\} \times \\ \times dq_1 dp_1 \dots dq_{\nu} dp_{\nu}, \quad (\text{A.51})$$

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\beta \left[\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{m_1\omega_1^2}{2} \left(q_1 - \lambda \frac{\Gamma_1 Q}{m_1\omega_1^2} \right)^2 \right]\right\} dq_1 dp_1 \times \dots \\ \dots \times \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\beta \left[\frac{p_{\nu}^2}{2m_{\nu}} + \frac{m_{\nu}\omega_{\nu}^2}{2} \left(q_{\nu} - \lambda \frac{\Gamma_{\nu} Q}{m_{\nu}\omega_{\nu}^2} \right)^2 \right]\right\} dq_{\nu} dp_{\nu}, \quad (\text{A.52})$$

que tem como resultado a Eq. (A.31):

$$Z = \prod_{\nu} \frac{2\pi}{\beta\omega_{\nu}}. \quad (\text{A.53})$$

Calculando o valor médio de $F(t)$:

$$\langle F(t) \rangle = \int F(t) P[\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0)] d\mathbf{q}(0) d\mathbf{p}(0), \quad (\text{A.54})$$

$$F(t) = \sum_{\nu} \Gamma_{\nu} \left\{ \left[q_{\nu}(0) - \frac{\lambda\Gamma_{\nu}}{m_{\nu}\omega_{\nu}^2} Q(0) \right] \cos(\omega_{\nu}t) + \frac{p_{\nu}(0)}{m_{\nu}\omega_{\nu}} \sin(\omega_{\nu}t) \right\}, \quad (\text{A.55})$$

$$P = Z^{-1} e^{-H_B^{(m)}/kT}, \quad (\text{A.56})$$

$$Z = \prod_{\nu} \frac{2\pi}{\beta\omega_{\nu}} \quad (\text{A.57})$$

$$H_B^{(m)} = \sum_{\nu} \left[\frac{p_{\nu}^2}{2m_{\nu}} + \frac{m_{\nu}\omega_{\nu}^2}{2} \left(q_{\nu} - \lambda \frac{\Gamma_{\nu} Q}{m_{\nu}\omega_{\nu}^2} \right)^2 \right], \quad (\text{A.58})$$

$$\langle F(t) \rangle = Z^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} (f_1 + f_2 + \dots f_{\nu}) \times \\ \times \exp\left\{-\beta \sum_{\nu} \left[\frac{p_{\nu}^2}{2m_{\nu}} + \frac{m_{\nu}\omega_{\nu}^2}{2} \left(q_{\nu} - \lambda \frac{\Gamma_{\nu} Q}{m_{\nu}\omega_{\nu}^2} \right)^2 \right]\right\} dq_1 dp_1 \dots dq_{\nu} dp_{\nu}, \quad (\text{A.59})$$

$$\begin{aligned}
\langle F(t) \rangle &= Z^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} f_1 \exp \left\{ -\beta \left[\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{m_1 \omega_1^2}{2} \left(q_1 - \lambda \frac{\Gamma_1 Q}{m_1 \omega_1^2} \right)^2 \right] \right\} dq_1 dp_1 \dots dq_\nu dp_\nu + \dots \\
&\dots + Z^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} f_\nu \exp \left\{ -\beta \left[\frac{p_\nu^2}{2m_\nu} + \frac{m_\nu \omega_\nu^2}{2} \left(q_\nu - \lambda \frac{\Gamma_\nu Q}{m_\nu \omega_\nu^2} \right)^2 \right] \right\} dq_1 dp_1 \dots dq_\nu dp_\nu.
\end{aligned} \tag{A.60}$$

Resolvendo a primeira das integrais:

$$\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{+\infty} f_1 \exp \left\{ -\beta \left[\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{m_1 \omega_1^2}{2} \left(q_1 - \lambda \frac{\Gamma_1 Q}{m_1 \omega_1^2} \right)^2 \right] \right\} dq_1 dp_1 \dots dq_\nu dp_\nu = \\
&\int_{-\infty}^{+\infty} \left[\Gamma_1 q_1 \cos(\omega_1 t) - \frac{\lambda \Gamma_1^2 Q}{m_1 \omega_1^2} \cos(\omega_1 t) + \frac{\Gamma_1 p_1}{m_1 \omega_1} \sin(\omega_1 t) \right] \times \\
&\times \exp \left\{ -\beta \sum_\nu \left[\frac{p_\nu^2}{2m_\nu} + \frac{m_\nu \omega_\nu^2}{2} \left(q_\nu - \lambda \frac{\Gamma_\nu Q}{m_\nu \omega_\nu^2} \right)^2 \right] \right\} dq_1 dp_1 \dots dq_\nu dp_\nu,
\end{aligned} \tag{A.61}$$

que podemos dividir em três integrais I_1 , I_2 e I_3 :

$$\begin{aligned}
I_1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma_1 q_1 \cos(\omega_1 t) \exp \left\{ -\beta \sum_\nu \left[\frac{p_\nu^2}{2m_\nu} + \frac{m_\nu \omega_\nu^2}{2} \left(q_\nu - \frac{\lambda \Gamma_\nu Q}{m_\nu \omega_\nu^2} \right)^2 \right] \right\} \times \\
&\times dq_1 dp_1 \dots dq_\nu dp_\nu,
\end{aligned} \tag{A.62}$$

$$\begin{aligned}
I_2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\lambda \Gamma_1^2 Q}{m_1 \omega_1^2} \cos(\omega_1 t) \exp \left\{ -\beta \sum_\nu \left[\frac{p_\nu^2}{2m_\nu} + \frac{m_\nu \omega_\nu^2}{2} \left(q_\nu - \frac{\lambda \Gamma_\nu Q}{m_\nu \omega_\nu^2} \right)^2 \right] \right\} \times \\
&\times dq_1 dp_1 \dots dq_\nu dp_\nu,
\end{aligned} \tag{A.63}$$

$$\begin{aligned}
I_3 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Gamma_1 p_1}{m_1 \omega_1} \sin(\omega_1 t) \exp \left\{ -\beta \sum_\nu \left[\frac{p_\nu^2}{2m_\nu} + \frac{m_\nu \omega_\nu^2}{2} \left(q_\nu - \frac{\lambda \Gamma_\nu Q}{m_\nu \omega_\nu^2} \right)^2 \right] \right\} \times \\
&\times dq_1 dp_1 \dots dq_\nu dp_\nu.
\end{aligned} \tag{A.64}$$

A Eq. (A.63) é a mesma que foi calculada para a função partição:

$$I_2 = \frac{\lambda \Gamma_1^2 Q}{m_1 \omega_1^2} \cos(\omega_1 t) \prod_\nu \frac{2\pi}{\beta \omega_\nu} \tag{A.65}$$

e I_3 é zero pelo mesmo motivo da (A.44), pois a integração é semelhante. Vamos agora

calcular detalhadamente I_1 :

$$I_1 = \Gamma_1 \cos(\omega_1 t) \int_{-\infty}^{+\infty} q_1 \exp \left\{ -\beta \left[\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{m_1 \omega_1^2}{2} \left(q_1 - \frac{\lambda \Gamma_1 Q}{m_1 \omega_1^2} \right)^2 \right] \right\} dq_1 dp_1 \times \\ \times \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\beta \sum_{\nu \neq 1} \left[\frac{p_\nu^2}{2m_\nu} + \frac{m_\nu \omega_\nu^2}{2} \left(q_\nu - \frac{\lambda \Gamma_\nu Q}{m_\nu \omega_\nu^2} \right)^2 \right] \right\} \dots dq_\nu dp_\nu. \quad (\text{A.66})$$

Fazendo a substituição de variáveis:

$$q_1 - \frac{\lambda \Gamma_1 Q}{m_1 \omega_1^2} = u, \quad (\text{A.67})$$

temos:

$$I_1 = \Gamma_1 \cos(\omega_1 t) \int_{-\infty}^{+\infty} \left(u + \frac{\lambda \Gamma_1 Q}{m_1 \omega_1^2} \right) \exp \left\{ -\beta \left[\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{m_1 \omega_1^2}{2} u^2 \right] \right\} dudp_1 \times \\ \times \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\beta \sum_{\nu \neq 1} \left[\frac{p_\nu^2}{2m_\nu} + \frac{m_\nu \omega_\nu^2}{2} \left(q_\nu - \frac{\lambda \Gamma_\nu Q}{m_\nu \omega_\nu^2} \right)^2 \right] \right\} \dots dq_\nu dp_\nu. \quad (\text{A.68})$$

Utilizando a Eq. (A.33):

$$I_1 = \frac{\lambda \Gamma_1^2 Q}{m_1 \omega_1^2} \cos(\omega_1 t) \prod_{\nu} \frac{2\pi}{\beta \omega_\nu}, \quad (\text{A.69})$$

substituindo Eqs. (A.65) e (A.69) na Eq. (A.61) e temos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_1 \exp \left\{ -\beta \left[\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{m_1 \omega_1^2}{2} \left(q_1 - \lambda \frac{\Gamma_1 Q}{m_1 \omega_1^2} \right)^2 \right] \right\} dq_1 dp_1 \dots dq_\nu dp_\nu = 0. \quad (\text{A.70})$$

Consequentemente a Eq. (A.60) torna-se

$$\langle F(t) \rangle = 0. \quad (\text{A.71})$$

Vamos agora calcular a função de correlação:

$$\langle F(t)F(\tau) \rangle = \int F(t)F(\tau)P[\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0)]d\mathbf{q}(0)d\mathbf{p}(0). \quad (\text{A.72})$$

Para simplificar, vamos escrever $F(\tau)$ e $F(t)$ como:

$$F(\tau) = \sum_k g_k(\tau), \quad (\text{A.73})$$

$$F(t) = \sum_j f_j(t), \quad (\text{A.74})$$

assim

$$\begin{aligned} \langle F(t)F(\tau) \rangle &= Z^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} [(f_1 g_1 + \dots + f_1 g_k) + \dots + (f_j g_1 + \dots + f_j g_k)] \times \\ &\quad \times \exp(H_B^{(m)}) dq_1 dp_1 \dots dp_\nu dq_\nu, \end{aligned} \quad (\text{A.75})$$

com a função partição sendo dada pela Eq. (A.53). Podemos ainda dividir a Eq. (A.75) em uma soma de integrais:

$$\begin{aligned} \langle F(t)F(\tau) \rangle &= Z^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} (f_1 g_1 + \dots + f_1 g_k) \exp(H_B^{(m)}) dq_1 dp_1 \dots dp_\nu dq_\nu + \dots \\ &\quad \dots + Z^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} (f_j g_1 + \dots + f_j g_k) \exp(H_B^{(m)}) dq_1 dp_1 \dots dp_\nu dq_\nu, \end{aligned} \quad (\text{A.76})$$

onde vamos resolver apenas a primeira delas,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (f_1 g_1 + \dots + f_1 g_k) \exp(H_B^{(m)}) dq_1 dp_1 \dots dp_\nu dq_\nu, \quad (\text{A.77})$$

que ainda pode ser escrita como uma soma de integrais

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} (f_1 g_1 + \dots + f_1 g_k) \exp(H_B^{(m)}) dq_1 dp_1 \dots dp_\nu dq_\nu &= \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} f_1 g_1 \exp(H_B^{(m)}) dq_1 dp_1 \dots dp_\nu dq_\nu + \dots \\ &\quad \dots + \int_{-\infty}^{+\infty} f_1 g_k \exp(H_B^{(m)}) dq_1 dp_1 \dots dp_\nu dq_\nu. \end{aligned} \quad (\text{A.78})$$

As integrais do tipo

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_1 g_k \exp(H_B^{(m)}) dq_1 dp_1 \dots dp_\nu dq_\nu, \quad (\text{A.79})$$

podem ainda ser escritas como

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} f_1 \exp \left\{ -\beta \left[\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{m_1 \omega_1^2}{2} \left(q_1 - \lambda \frac{\Gamma_1 Q}{m_1 \omega_1^2} \right)^2 \right] \right\} dq_1 dp_1 \times \\ & \times \int_{-\infty}^{+\infty} g_k \exp \left\{ -\beta \left[\frac{p_k^2}{2m_k} + \frac{m_k \omega_k^2}{2} \left(q_k - \lambda \frac{\Gamma_k Q}{m_k \omega_k^2} \right)^2 \right] \right\} dq_k dp_k \times \\ & \times \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\beta \left[\sum_{\nu \neq 1, k} \frac{p_\nu^2}{2m_\nu} + \frac{m_\nu \omega_\nu^2}{2} \left(q_\nu - \lambda \frac{\Gamma_\nu Q}{m_\nu \omega_\nu^2} \right)^2 \right] \right\} dq_2 dp_2 \dots dp_\nu dq_\nu, \end{aligned} \quad (\text{A.80})$$

com $\nu \neq 1$ e k . A primeira das integras da (A.80) já foi resolvida na (A.70), assim

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_1 g_k \exp \left(H_B^{(m)} \right) dq_1 dp_1 \dots dp_\nu dq_\nu = 0. \quad (\text{A.81})$$

Precisamos agora resolver

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_1 g_1 \exp \left(H_B^{(m)} \right) dq_1 dp_1 \dots dp_\nu dq_\nu. \quad (\text{A.82})$$

Vamos primeiramente calcular os elementos de $f_1 g_1$:

$$\begin{aligned} f_1 g_1 &= \Gamma_1 \left\{ \left[q_1(0) - \frac{\lambda \Gamma_1}{m_1 \omega_1^2} Q(0) \right] \cos(\omega_1 t) + \frac{p_1(0)}{m_1 \omega_1} \sin(\omega_1 t) \right\} \times \\ & \Gamma_1 \left\{ \left[q_1(0) - \frac{\lambda \Gamma_1}{m_1 \omega_1^2} Q(0) \right] \cos(\omega_1 \tau) + \frac{p_1(0)}{m_1 \omega_1} \sin(\omega_1 \tau) \right\}, \quad (\text{A.83}) \\ f_1 g_1 &= \Gamma_1^2 \left[q_1(0) - \frac{\lambda \Gamma_1}{m_1 \omega_1^2} Q(0) \right]^2 \cos(\omega_1 t) \cos(\omega_1 \tau) + \\ & + \Gamma_1^2 \frac{p_1^2(0)}{m_1^2 \omega_1^2} \sin(\omega_1 t) \sin(\omega_1 \tau) + \\ & + \Gamma_1^2 \left[q_1(0) - \frac{\lambda \Gamma_1}{m_1 \omega_1^2} Q(0) \right] \frac{p_1(0)}{m_1 \omega_1} (\cos(\omega_1 t) \sin(\omega_1 \tau) + \cos(\omega_1 \tau) \sin(\omega_1 t)). \end{aligned} \quad (\text{A.84})$$

Agora podemos calcular a Eq. (A.82):

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} f_1 g_1 \exp \left(H_B^{(m)} \right) dq_1 dp_1 \dots dp_\nu dq_\nu = \\ & \cos(\omega_1 t) \cos(\omega_1 \tau) \Gamma_1^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left[q_1(0) - \frac{\lambda \Gamma_1}{m_1 \omega_1^2} Q(0) \right]^2 \times \\ & \times \exp \left(H_B^{(m)} \right) dq_1 dp_1 \dots dp_\nu dq_\nu + \\ & + \frac{\Gamma_1^2}{m_1^2 \omega_1^2} \sin(\omega_1 t) \sin(\omega_1 \tau) \int_{-\infty}^{+\infty} p_1^2(0) \exp \left(H_B^{(m)} \right) dq_1 dp_1 \dots dp_\nu dq_\nu, \end{aligned} \quad (\text{A.85})$$

pois a integração do terceiro termo é zero.

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{+\infty} f_1 g_1 \exp\left(H_B^{(m)}\right) dq_1 dp_1 \dots dp_\nu dq_\nu = \\
& \cos(\omega_1 t) \cos(\omega_1 \tau) \Gamma_1^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left[q_1(0) - \frac{\lambda \Gamma_1}{m_1 \omega_1^2} Q(0) \right]^2 \times \\
& \times \exp \left\{ -\beta \left[\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{m_1 \omega_1^2}{2} \left(q_1 - \lambda \frac{\Gamma_1 Q}{m_1 \omega_1^2} \right)^2 \right] \right\} dq_1 dp_1 \times \\
& \times \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\beta \left[\sum_{\nu \neq 1} \frac{p_\nu^2}{2m_\nu} + \frac{m_\nu \omega_\nu^2}{2} \left(q_\nu - \lambda \frac{\Gamma_\nu Q}{m_\nu \omega_\nu^2} \right)^2 \right] \right\} dq_2 dp_2 \dots dp_\nu dq_\nu + \\
& + \frac{\Gamma_1^2}{m_1^2 \omega_1^2} \sin(\omega_1 t) \sin(\omega_1 \tau) \int_{-\infty}^{+\infty} p_1^2(0) \times \\
& \times \exp \left\{ -\beta \left[\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{m_1 \omega_1^2}{2} \left(q_1 - \lambda \frac{\Gamma_1 Q}{m_1 \omega_1^2} \right)^2 \right] \right\} dq_1 dp_1 \times \\
& \times \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\beta \left[\sum_{\nu \neq 1} \frac{p_\nu^2}{2m_\nu} + \frac{m_\nu \omega_\nu^2}{2} \left(q_\nu - \lambda \frac{\Gamma_\nu Q}{m_\nu \omega_\nu^2} \right)^2 \right] \right\} dq_2 dp_2 \dots dp_\nu dq_\nu \quad (\text{A.86})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{+\infty} f_1 g_1 \exp\left(H_B^{(m)}\right) dq_1 dp_1 \dots dp_\nu dq_\nu = \\
& \cos(\omega_1 t) \cos(\omega_1 \tau) \Gamma_1^2 \sqrt{\frac{2m_1 \pi}{\beta}} \prod_{\nu \neq 1} \frac{2\pi}{\beta \omega_\nu} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(q_1(0) - \frac{\lambda \Gamma_1}{m_1 \omega_1^2} Q(0) \right)^2 \times \\
& \times \exp \left[-\frac{\beta m_1 \omega_1^2}{2} \left(q_1 - \lambda \frac{\Gamma_1 Q}{m_1 \omega_1^2} \right)^2 \right] dq_1 + \\
& + \frac{\Gamma_1^2 \sin(\omega_1 t) \sin(\omega_1 \tau)}{m_1^2 \omega_1^2} \sqrt{\frac{2\pi}{\beta m_1 \omega_1^2}} \prod_{\nu \neq 1} \frac{2\pi}{\beta \omega_\nu} \int_{-\infty}^{+\infty} p_1^2(0) \exp \left(-\frac{\beta p_1^2}{2m_1} \right) dp_1. \quad (\text{A.87})
\end{aligned}$$

Para resolver ambas as integrais restantes utilizamos a seguinte integral [66]:

$$\int_0^{+\infty} x^{2n} e^{-px^2} dx = \frac{(2n-1)!!}{2(2p)^n} \sqrt{\frac{\pi}{p}}, \quad (\text{A.88})$$

de modo que a (A.87) tem como resultado

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{+\infty} f_1 g_1 \exp\left(H_B^{(m)}\right) dq_1 dp_1 \dots dp_\nu dq_\nu = \\
& \frac{\Gamma_1^2 \cos(\omega_1 t) \cos(\omega_1 \tau)}{m_1 \omega_1^2} \prod_{\nu} \frac{2\pi}{\beta \omega_\nu} + \frac{\Gamma_1^2 \sin(\omega_1 t) \sin(\omega_1 \tau)}{m_1 \omega_1^2} \prod_{\nu} \frac{2\pi}{\beta \omega_\nu} \quad (\text{A.89})
\end{aligned}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_1 g_1 \exp\left(H_B^{(m)}\right) dq_1 dp_1 \dots dp_\nu dq_\nu = \frac{\Gamma_1^2}{m_1 \omega_1^2} \cos[\omega_1(t-\tau)] \prod_{\nu} \frac{2\pi}{\beta \omega_\nu}. \quad (\text{A.90})$$

Com os resultados das Eqs. (A.90) e (A.81) na Eq. (A.77), e procedendo de forma análoga com as demais integrais da Eq. (A.76), obtemos para a Eq. (A.72):

$$\langle F(t)F(\tau) \rangle = kT \sum_{\nu} \frac{\Gamma_{\nu}^2}{m_{\nu}\omega_{\nu}^2} \cos[\omega_{\nu}(t - \tau)]. \quad (\text{A.91})$$

$$\langle F(t)F(\tau) \rangle = kTK(t - \tau), \quad (\text{A.92})$$

Teoria da Resposta Linear

Seguindo os passos apresentados em [57], vamos demonstrar primeiramente que a Eq. (4.7) possui a forma integral (4.10). Para isto, pegamos primeiramente a Eq. (4.10)

$$\rho(t) = e^{i(t-t_0)L_0}\rho(t_0) + i \int_{t_0}^t e^{i(t-s)L_0} L_I(s)\rho(s)ds, \quad (\text{B.1})$$

e derivarmos em relação ao tempo utilizando a Regra de Leibniz

$$\frac{d}{dz} \int_{a(z)}^{b(z)} f(z, x)dx = \int_{a(z)}^{b(z)} \frac{\partial f(z, x)}{\partial z} dx + f(b(z), z) \frac{db(z)}{dz} - f(a(z), z) \frac{da(z)}{dz}, \quad (\text{B.2})$$

chegando em

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= iL_0 e^{i(t-t_0)L_0} \rho(t_0) + \\ & i \left[L_I(t)\rho(t) + \int_{t_0}^t iL_0 e^{i(t-s)L_0} L_I(s)\rho(s)ds \right] \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= iL_0 \left[e^{i(t-t_0)L_0} \rho(t_0) + i \int_{t_0}^t e^{i(t-s)L_0} L_I(s)\rho(s)ds \right] + \\ & iL_I(t)\rho(t), \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

onde a equação entre colchetes é justamente Eq. (B.1), tal que

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = iL_0\rho(t) + iL_I(t)\rho(t) \quad (\text{B.5})$$

Agora, mostraremos como a Eq. (4.23) fornece a Eq. (4.25). Para isso, expandimos o

Colchete de Poisson em

$$\phi_{BA}(t-s) = \int B(Q, P) e^{i(t-s)L_0} \{-A(Q, P), \rho_e(Q, P)\} dQ dP, \quad (\text{B.6})$$

obtendo

$$\begin{aligned} \phi_{BA}(t-s) &= \int B(Q, P) e^{i(t-s)L_0} \frac{\partial \rho_e}{\partial Q} \frac{\partial A}{\partial P} dQ dP - \\ &\int B(Q, P) e^{i(t-s)L_0} \frac{\partial \rho_e}{\partial P} \frac{\partial Q}{\partial P} dQ dP, \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

as quais podem ser integradas por partes, fornecendo

$$\begin{aligned} \phi_{BA}(t-s) &= \\ &\int \frac{\partial A}{\partial P} \left(\rho_e B(Q, P) e^{i(t-s)L_0} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int \rho_e \frac{\partial}{\partial Q} (B(Q, P) e^{i(t-s)L_0}) dQ \right) dP - \\ &\int \frac{\partial A}{\partial Q} \left(\rho_e B(Q, P) e^{i(t-s)L_0} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int \rho_e \frac{\partial}{\partial P} (B(Q, P) e^{i(t-s)L_0}) dP \right) dQ. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Considerando $B(Q, P) e^{i(t-s)L_0} = B(t-s)$ e que $\rho_e \rightarrow 0$ quando $Q, P \rightarrow \infty$, concluímos nosso objetivo

$$\begin{aligned} \phi_{BA}(t-s) &= \left[- \int \rho_e \frac{\partial A}{\partial P} \frac{\partial B(t-s)}{\partial Q} dQ dP \right. \\ &\left. + \int \rho_e \frac{\partial A}{\partial Q} \frac{\partial B(t-s)}{\partial P} dQ dP \right], \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

$$\phi_{BA}(t-s) = \int \rho_e \{A, B(t-s)\} dQ dP, \quad (\text{B.10})$$

$$\phi_{BA}(t-s) = \int \rho_e \{A, B(Q(t-s), P(t-s))\} dQ dP, \quad (\text{B.11})$$

$$\phi_{BA}(t-s) = \langle \{A, B(Q(t-s), P(t-s))\} \rangle_e, \quad (\text{B.12})$$

$$\phi_{BA}(t-s) = \langle \{A[Q(t), P(t)], B[Q(s), P(s)]\} \rangle_e, \quad (\text{B.13})$$

Cálculo da Função Resposta

A função resposta em $s = 0$ é dada por:

$$\phi_{XX}(t) = \int X(t) \{\rho_e(Q, P), X(0)\} dQdP, \quad (\text{C.1})$$

onde

$$dQdP = \prod_{i=1}^N dx_i dy_i dp_{x_i} dp_{y_i}. \quad (\text{C.2})$$

Escolhemos trabalhar com $s = 0$ por questão de notação, não modificando o resultado final.

Calculamos agora o Colchete de Poisson em (C.1)

$$\{\rho_e, X(0)\} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial \rho_e}{\partial x_i(0)} \frac{\partial x_i(0)}{\partial p_{x_i}(0)} - \frac{\partial \rho_e}{\partial p_{x_i}(0)} \frac{\partial x_i(0)}{\partial x_i(0)} = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial \rho_e}{\partial p_{x_i}(0)}, \quad (\text{C.3})$$

que é substituído novamente em (C.1),

$$\phi_{XX}(t) = - \int \sum_{j=1}^N x_j(t) \sum_{i=1}^N \frac{\partial \rho_e}{\partial p_{x_i}(0)} dQdP = - \int \sum_{i,j=1}^N x_j(t) \frac{\partial \rho_e}{\partial p_{x_i}(0)} dQdP. \quad (\text{C.4})$$

A Eq. (C.4) pode ter sua derivada trabalhada utilizando a regra da cadeia, o que fornece

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial p_{x_i}(0)} = \frac{\partial \rho_e}{\partial H_B^{(i)}(0)} \frac{\partial H_B^{(i)}(0)}{\partial p_{x_i}(0)} = \frac{\partial \rho_e}{\partial H_B^{(i)}(0)} p_{x_i}(0), \quad (\text{C.5})$$

$$\phi_{XX}(t) = - \int \sum_{i,j=1}^N x_j(t) p_{x_i}(0) \frac{\partial \rho_e}{\partial H_B^{(i)}(0)} dQ dP. \quad (\text{C.6})$$

Usando a seguinte transformação de variáveis [34]

$$x_i^2 = \sqrt{\frac{2H_B^{(i)}}{\cos 2\theta_i}} \left[\frac{\cos \theta_i}{\sqrt{1+a}} + \frac{\sin \theta_i}{\sqrt{1-a}} \right] \sin \xi_i, \quad (\text{C.7})$$

$$y_i^2 = \sqrt{\frac{2H_B^{(i)}}{\cos 2\theta_i}} \left[\frac{\cos \theta_i}{\sqrt{1+a}} - \frac{\sin \theta_i}{\sqrt{1-a}} \right] \sin \xi_i, \quad (\text{C.8})$$

$$p_{x_i} = \sqrt{2H_B^{(i)}} \cos \varphi_i \cos \xi_i, \quad (\text{C.9})$$

$$p_{y_i} = \sqrt{2H_B^{(i)}} \sin \varphi_i \cos \xi_i, \quad (\text{C.10})$$

onde

$$0 < \theta_i \leq \theta_0 < \frac{\pi}{4}, \quad (\text{C.11})$$

$$0 \leq \xi_i \leq \frac{\pi}{2}, \quad (\text{C.12})$$

$$0 \leq \varphi_i \leq 2\pi, \quad (\text{C.13})$$

$$\tan \theta_0 = \sqrt{\frac{1-a}{1+a}}, \quad (\text{C.14})$$

podemos calcular a matriz Jacobiana [36] e fazer uma transformação de variáveis na integral (C.6). Calculando a Jacobiana,

$$J = \begin{bmatrix} J_1(H_B^{(1)}, \theta_1, \varphi_1, \xi_1) & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & J_N(H_B^{(N)}, \theta_N, \varphi_N, \xi_N) \end{bmatrix}, \quad (\text{C.15})$$

onde

$$J_i(H_B^{(i)}, \theta_i, \varphi_i, \xi_i) = \begin{bmatrix} \frac{\partial x_i}{\partial H_B} & \frac{\partial x_i}{\partial \theta_i} & \frac{\partial x_i}{\partial \varphi_i} & \frac{\partial x_i}{\partial \xi_i} \\ \frac{\partial y_i}{\partial H_B} & \frac{\partial y_i}{\partial \theta_i} & \frac{\partial y_i}{\partial \varphi_i} & \frac{\partial y_i}{\partial \xi_i} \\ \frac{\partial p_{x_i}}{\partial H_B} & \frac{\partial p_{x_i}}{\partial \theta_i} & \frac{\partial p_{x_i}}{\partial \varphi_i} & \frac{\partial p_{x_i}}{\partial \xi_i} \\ \frac{\partial p_{y_i}}{\partial H_B} & \frac{\partial p_{y_i}}{\partial \theta_i} & \frac{\partial p_{y_i}}{\partial \varphi_i} & \frac{\partial p_{y_i}}{\partial \xi_i} \end{bmatrix}. \quad (\text{C.16})$$

Logo, o determinante de (C.15) pode ser escrito como

$$J = \left(H_B^{(1)} H_B^{(2)} \cdots H_B^{(N)} \right)^{\frac{1}{2}} [f_1(\theta_1, \varphi_1, \xi_1) \cdots f_N(\theta_N, \varphi_N, \xi_N)]. \quad (\text{C.17})$$

Fazendo a troca de variáveis na integral (C.6),

$$\phi_{XX}(t) = - \int \sum_{i,j=1} x_j(t) p_{x_i}(0) \frac{\partial \rho_e}{\partial H_B^{(i)}} J dQ dP, \quad (\text{C.18})$$

com

$$dQ dP = \prod_{i=1}^N dH_B^{(i)} d\theta_i d\varphi_i d\xi_i. \quad (\text{C.19})$$

Agora, usamos a relação

$$\frac{\partial}{\partial H_B^{(i)}} (x_j(t) p_{x_i}(0) \rho_e J) = x_j(t) p_{x_i}(0) \frac{\partial \rho_e}{\partial H_B^{(i)}} J + \frac{\partial}{\partial H_B^{(i)}} (x_j(t) p_{x_i}(0) J) \rho_e, \quad (\text{C.20})$$

de forma que a Eq. (C.18) torna-se

$$\phi_{XX}(t) = \int \sum_{i,j=1} \frac{\partial}{\partial H_B^{(i)}} (x_j(t) p_{x_i}(0) J) \rho_e dQ dP, \quad (\text{C.21})$$

devido a integral em φ_i do termo

$$\frac{\partial}{\partial H_B^{(i)}} (x_j(t) p_{x_i}(0) \rho_e J) \quad (\text{C.22})$$

anular-se. Calculando a derivada no integrando de (C.21), e voltando para as antigas variáveis, obtemos

$$\phi_{XX}(t) = \int \left\{ \sum_{i,j=1} \frac{\partial}{\partial H_B^{(i)}} (x_j(t) p_{x_i}(0)) J + x_j(t) p_{x_i}(0) \frac{\partial J}{\partial H_B^{(i)}} \right\} \frac{\rho_e}{J} dQ dP, \quad (\text{C.23})$$

ou ainda,

$$\begin{aligned} \phi_{XX}(t) = & \left\langle \sum_{i,j=1} \frac{\partial}{\partial H_B^{(i)}} (x_j(t) p_{x_i}(0)) \right\rangle_e + \\ & \left\langle \sum_{i,j=1} x_j(t) p_{x_i}(0) \frac{1}{J} \frac{\partial J}{\partial H_B^{(i)}} \right\rangle_e, \end{aligned} \quad (\text{C.24})$$

onde $\langle \dots \rangle_e$ indica uma média no ensemble Pseudo-Canônico, ou seja, uma média das

variáveis do banho antes do sistema ser acoplado.

Utilizamos a propriedade de reescala do potencial quártico [34]

$$p_{x_i}(t) = \left(\frac{H_B^{(i)}}{E_B^{(i)}} \right)^{\frac{1}{2}} p'_{x_i}(t'), \quad (\text{C.25})$$

$$x_i(t) = \left(\frac{H_B^{(i)}}{E_B^{(i)}} \right)^{\frac{1}{4}} x'_i(t'), \quad (\text{C.26})$$

$$t = \left(\frac{H_B^{(i)}}{E_B^{(i)}} \right)^{-\frac{1}{4}} t', \quad (\text{C.27})$$

para calcular as derivadas na integral (C.24). Assim, para o segundo termo,

$$\frac{1}{J} \frac{\partial J}{\partial H_B^{(i)}} = \frac{1}{2} \frac{\left(H_B^{(i)} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(H_B^{(1)} \dots H_B^{(i-1)} H_B^{(i+1)} \dots H_B^{(N)} \right)}{\left(H_B^{(1)} \dots H_B^{(N)} \right)^{\frac{1}{2}}} \quad (\text{C.28})$$

$$\frac{1}{J} \frac{\partial J}{\partial H_B^{(i)}} = \frac{1}{2H_B^{(i)}}. \quad (\text{C.29})$$

A derivada do primeiro termo é dada por

$$\frac{\partial}{\partial H_B^{(i)}} (x_j(t)p_{x_i}(0)) = \frac{\partial}{\partial H_B^{(i)}} \left[\left(\frac{H_B^{(i)}}{E_B^{(i)}} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{H_B^{(j)}}{E_B^{(j)}} \right)^{\frac{1}{4}} x'_j(t') p'_{x_i}(0) \right]. \quad (\text{C.30})$$

Dividiremos a análise agora em duas partes, o caso $i = j$ e o caso $i \neq j$. Para o primeiro caso temos,

$$\frac{\partial}{\partial H_B^{(i)}} (x_i(t)p_{x_i}(0)) = \frac{\partial}{\partial H_B^{(i)}} \left[\left(\frac{H_B^{(i)}}{E_B^{(i)}} \right)^{\frac{3}{4}} (x'_i(t') p'_{x_i}(0)) \right], \quad (\text{C.31})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial H_B^{(i)}} (x_i(t)p_{x_i}(0)) &= \frac{3}{4} \left(\frac{H_B^{(i)}}{E_B^{(i)}} \right)^{-\frac{1}{4}} \frac{x'_i(t') p'_{x_i}(0)}{E_B^{(i)}} + \\ &\quad \left(\frac{H_B^{(i)}}{E_B^{(i)}} \right)^{\frac{3}{4}} p'_{x_i}(0) \frac{\partial x'_i(t')}{\partial t'} \frac{\partial t'}{\partial H_B^{(i)}}. \end{aligned} \quad (\text{C.32})$$

Calculamos a derivada de t' ,

$$\frac{\partial t'}{\partial H_B^{(i)}} = \frac{\partial}{\partial H_B^{(i)}} \left[\left(\frac{H_B^{(i)}}{E_B^{(i)}} \right)^{\frac{1}{4}} t \right], \quad (\text{C.33})$$

$$\frac{\partial t'}{\partial H_B^{(i)}} = \frac{1}{4} \frac{\partial}{\partial H_B^{(i)}} \left[\left(\frac{H_B^{(i)}}{E_B^{(i)}} \right)^{-\frac{3}{4}} \frac{t}{E_B^{(i)}} \right], \quad (\text{C.34})$$

a qual substituímos novamente na Eq. (C.32).

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial H_B^{(i)}} (x_i(t)p_{x_i}(0)) &= \frac{3}{4E_B^{(i)}} \left(\frac{H_B^{(i)}}{E_B^{(i)}} \right)^{-\frac{1}{4}} x'_i(t')p'_{x_i}(0) + \\ &\frac{t}{4E_B^{(i)}} \left(\frac{H_B^{(i)}}{E_B^{(i)}} \right)^{-\frac{1}{4}} \left(\frac{H_B^{(i)}}{E_B^{(i)}} \right)^{\frac{1}{4}} p'_{x_i}(t')p'_{x_i}(0), \end{aligned} \quad (\text{C.35})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial H_B^{(i)}} (x_i(t)p_{x_i}(0)) &= \frac{3}{4E_B^{(i)}} \frac{[E_B^{(i)}]^{\frac{1}{4}}}{[H_B^{(i)}]^{\frac{1}{4}}} x'_i(t')p'_{x_i}(0) + \\ &\frac{t}{4E_B^{(i)}} p'_{x_i}(t')p'_{x_i}(0), \end{aligned} \quad (\text{C.36})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial H_B^{(i)}} (x_i(t)p_{x_i}(0)) &= \frac{3}{4} \frac{1}{[E_B^{(i)}]^{\frac{3}{4}} [H_B^{(i)}]^{\frac{1}{4}}} x'_i(t')p'_{x_i}(0) + \\ &\frac{t}{4E_B^{(i)}} p'_{x_i}(t')p'_{x_i}(0), \end{aligned} \quad (\text{C.37})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial H_B^{(i)}} (x_i(t)p_{x_i}(0)) &= \frac{3}{4} \frac{1}{[E_B^{(i)}]^{\frac{3}{4}} [H_B^{(i)}]^{\frac{1}{4}}} \frac{x_i(t)}{\left(\frac{H_B^{(i)}}{E_B^{(i)}} \right)^{\frac{1}{4}}} \frac{p_{x_i}(0)}{\left(\frac{H_B^{(i)}}{E_B^{(i)}} \right)^{\frac{1}{2}}} + \\ &\frac{t}{4E_B^{(i)}} \frac{p_{x_i}(t)}{\left(\frac{H_B^{(i)}}{E_B^{(i)}} \right)^{\frac{1}{2}}} \frac{p_{x_i}(0)}{\left(\frac{H_B^{(i)}}{E_B^{(i)}} \right)^{\frac{1}{2}}}. \end{aligned} \quad (\text{C.38})$$

Fazendo $E_B^{(i)} = 1$, uma vez que a dinâmica do sistema é a mesma em todas as superfícies de energia, obtemos

$$\frac{\partial}{\partial H_B^{(i)}} (x_i(t)p_{x_i}(0)) = \frac{3}{4H_B^{(i)}} x_i(t)p_{x_i}(0) + \frac{t}{4H_B^{(i)}} p_{x_i}(t)p_{x_i}(0). \quad (\text{C.39})$$

Para o caso $i \neq j$, temos

$$\frac{\partial}{\partial H_B^{(i)}} (x_j(t)p_{x_i}(0)) = \left(\frac{H_B^{(i)}}{E_B^{(i)}} \right)^{\frac{1}{2}} x_j(t)p'_{x_i}(0), \quad (\text{C.40})$$

$$\frac{\partial}{\partial H_B^{(i)}} (x_j(t)p_{x_i}(0)) = \frac{1}{2E_B^{(i)}} \left(\frac{H_B^{(i)}}{E_B^{(i)}} \right)^{-\frac{1}{2}} x_j(t) \frac{p_{x_i}(0)}{\left(\frac{H_B^{(i)}}{E_B^{(i)}} \right)^{\frac{1}{2}}}, \quad (\text{C.41})$$

$$\frac{\partial}{\partial H_B^{(i)}} (x_j(t)p_{x_i}(0)) = \frac{1}{2H_B^{(i)}} x_j(t)p_{x_i}(0). \quad (\text{C.42})$$

Este resultado nos permite reescrever a Eq. (C.24) como

$$\begin{aligned} \phi_{XX}(t-s) &= \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{1}{2H_B^{(i)}} x_i(t)p_{x_i}(s) \right\rangle_e + \left\langle \sum_{j \neq i}^N \frac{1}{2H_B^{(i)}} x_j(t)p_{x_i}(s) \right\rangle_e + \\ &\left\langle \sum_{i=1}^N \frac{3}{4H_B^{(i)}} x_i(t)p_{x_i}(s) \right\rangle_e + \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{(t-s)}{4H_B^{(i)}} p_{x_i}(t)p_{x_i}(s) \right\rangle_e + \\ &\left\langle \sum_{j \neq i}^N \frac{1}{2H_B^{(i)}} x_j(t)p_{x_i}(s) \right\rangle_e, \end{aligned} \quad (\text{C.43})$$

onde substituímos $t \rightarrow t-s$ e trocamos $0 \rightarrow s$. No entanto, o produto das funções de $t-s$ por funções de s , é equivalente ao produto de uma função de t por uma função de s . Reagrupando os termos em (C.43), chegamos na função resposta

$$\begin{aligned} \phi_{XX}(t-s) &= \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{(t-s)}{4H_B^{(i)}} p_{x_i}(t)p_{x_i}(s) \right\rangle_e + \\ &\left\langle \sum_{i=1}^N \frac{5}{4H_B^{(i)}} x_i(t)p_{x_i}(s) \right\rangle_e + \\ &\left\langle \sum_{j \neq i}^N \frac{1}{H_B^{(i)}} x_j(t)p_{x_i}(s) \right\rangle_e. \end{aligned} \quad (\text{C.44})$$

No entanto, o valor médio do produto de funções de sistemas diferentes é zero, logo

$$0 = \left\langle \sum_{j \neq i}^N \frac{1}{H_B^{(i)}} x_j(t)p_{x_i}(s) \right\rangle_e, \quad (\text{C.45})$$

de modo que

$$\phi_{XX}(t-s) = \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{(t-s)}{4H_B^{(i)}} p_{x_i}(t)p_{x_i}(s) \right\rangle_e + \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{5}{4H_B^{(i)}} x_i(t)p_{x_i}(s) \right\rangle_e. \quad (\text{C.46})$$

Podemos reescrever os termos do lado direito da Eq. (C.46) como

$$\sum_{i=1}^N \frac{5}{4H_B^{(i)}} x_i(t) p_{x_i}(s) = \frac{d}{ds} \sum_{i=1}^N \frac{5}{4H_B^{(i)}} x_i(t) x_i(s), \quad (\text{C.47})$$

$$\sum_{i=1}^N \frac{1}{4H_B^{(i)}} p_{x_i}(t) p_{x_i}(s) = \frac{d^2}{dsdt} \sum_{i=1}^N \frac{1}{4H_B^{(i)}} x_i(t) x_i(s), \quad (\text{C.48})$$

$$C_N(t-s) = \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{x_i(t) x_i(s)}{H_B^{(i)}} \right\rangle_e. \quad (\text{C.49})$$

Se fizermos

$$H_B^{(i)} = E_B^{(i)}, \quad (\text{C.50})$$

e definirmos

$$C_N(t-s) = \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{x_i(t) x_i(s)}{E_B^{(i)}} \right\rangle_e, \quad (\text{C.51})$$

a Eq. (C.46) torna-se

$$\phi_{XX}(t-s) = \frac{5}{4} \frac{d}{ds} C_N(t-s) + \frac{(t-s)}{4} \frac{d^2}{dsdt} C_N(t-s), \quad (\text{C.52})$$

que é o resultado que desejamos mostrar.

Referências Bibliográficas

- [1] R. Brow, *Philosophical Magazine N. S.*, 4, 161, 1828.
- [2] A. Einstein, *Ann. der Phys.*, 17, 549, 1905.
- [3] R. Kubo, *Science*, 233, 330, 1986.
- [4] A. O. Caldeira, A. J. Leggett, *Physica*, Amsterdam, 121A, 587, 1983.
- [5] V. B. Magalinskii, *Sov. Phys. JETP* 9, 1381, 1959.
- [6] P. Ullersma, *Physica*, 32, 27, 1966.
- [7] Emilio Cortés, Bruce J. West, e Katja Lindenberg *J. Chem. Phys.*, 82, 2708, 1985;
- [8] J. R. Chaudhuri, P. Chaudhury, S. Chattopadhyay, *J. Chem. Phys.*, 130, 234109, 2009.
- [9] S. Kawai, T. Komatsuzaki, *J. Chem. Phys.*, 134, 114523, 2011.
- [10] J. Bao, *Physical Review A*, 69, 022102, 2004.
- [11] M. Evstigneev, P. Reimann, *Physical Review B*, 82, 224303, 2010.
- [12] L. Kantorovich, *Physical Review B*, 78, 094304, 2008.
- [13] J. R. Chaudhuri, D. Barik, S. K. Banik, *Physical Review E*, 74, 061119, 2006.
- [14] G. W. Ford, M. Kac, P. Mazur, *J. Math. Phys.* 6, 504, 1965.
- [15] A. Damjanović, I. Kosztin, U. Kleinekathöfer, K. Schulten, *Physical Review E*, 65, 021919, 2002.
- [16] J. Rosa, M. W. Beims, *Physica A*, 342, 29, 2004.

- [17] J. Rosa, M. W. Beims, *Physica A*, 382, 54, 2007.
- [18] J. Rosa, M. W. Beims, *Physical Review E*, 78, 031126, 2008.
- [19] C. Manchein, J. Rosa, M. W. Beims, *Physica D*, 238, 1688, 2009.
- [20] S. T. Smith, R. Onofrio, *The European Physical Journal B* 61, 271, 2008.
- [21] Q. Wei, S. T. Smith, R. Onofrio, *Physical Review E*, 79, 031128, 2009.
- [22] P. Hänggi, G. Ingold, P. Talkner, *New Journal of Physics*, 10, 115008, 2008.
- [23] G. Ingold, P. Hänggi, P. Talkner, *Physical Review E*, 79, 061105, 2009.
- [24] A. Carcaterra, A. Akay, *Physical Review E*, 84, 011121, 2011.
- [25] H. Hasegawa, *Physical Review E* 84, 011145, 2011.
- [26] M. Campisi, P. Talkner, P. Hänggi, *Physical Review E* 80, 031145, 2009.
- [27] J. D. Ramshaw, *Physics Letters A*, 198, 122, 1998.
- [28] D. P. Visco, S. Sen, *Physical Review E*, 57, 224, 1998.
- [29] D. P. Visco, S. Sen, *Physical Review E*, 58, 1419, 1998.
- [30] M. Wilkinson, *J. Phys. A: Math. Gen.*, 23, 3603, 1990.
- [31] M. V. Berry, J. M. Robbins, *Proc. R. Soc. London A*, 442, 659, 1993.
- [32] M. A. Marchiori, M. A. M. de Aguiar *Physical Review E*, 83, 061112, 2011.
- [33] T. O. de Carvalho, M. A. M. de Aguiar, *Physical Review Letters* 76, 2690, 1995.
- [34] M. V. S. Bonança, M. A. M. Aguiar, *Physica A* 365, 333, 2006.
- [35] C. Jarzynski, *Physical Review Letters* 74, 2973, 1995.
- [36] E. Ott, *Chaos in Dynamical Systems*, Cambridge University Press, New York, 2000.
- [37] H. Goldstein, C. P. Poole e J. Safko, *Classical Mechanics*, 3a. ed., Prentice Hall / 2002.
- [38] V. I. Arnold, A. Avez, *Ergodic Problems of Classical Mechanics*, Benjamin, New York, 1968.
- [39] G. M. Zaslavski, *Hamiltonian Chaos & Fractional Dynamics*, Oxford University Press, New York, 2005.

- [40] G. M. Zaslavski, *The Physics of Chaos in Hamiltonian Systems*, Imperial College Press, Singapore, 2007.
- [41] N. A. Lemos, *Mecânica Analítica*, Livraria da Física, São Paulo, 2007.
- [42] K. T. Alligood, T. D. Sauer, J. A. Yorke, *Chaos An Introduction to Dynamical Systems*, Springer, New York, 1996.
- [43] A. J. Lichtenberg, M. A. Lieberman, *Regular and Chaotic Dynamics*, Springer-Verlag, New York, 1992.
- [44] G. Contopoulos, *Order and Chaos in Dynamical Astronomy*, Springer, Berlin, 2010.
- [45] A. Wolf, J. B. Swift, H. L. Swinney, J. A. Vastano, *Physica D*, 16, 285, 1985.
- [46] T. Tomé, M. J. Oliveira, *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*, Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2001.
- [47] H. B. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, John Wiley & Sons, Singapore, 1985.
- [48] Salinas, Sílvio R. A., *Introdução à Física Estatística* Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2005.
- [49] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation*, Springer-Verlag, Berlin, 1989.
- [50] N. G. van Kampen *J. Phys. Chem. B*, 109, 21293, 2005.
- [51] A. Einstein, *Investigations on the Theory of Brownian Movement*, Methuen and Co. Ltd., London, 1926.
- [52] E. Ott, *Physical Review Letters*, 42, 1628, 1979.
- [53] R. Brown, E. Ott, C. Grebogi, *Physical Review Letters*, 59, 1173, 1987.
- [54] T. O. de Carvalho, *A Dinâmica Caótica Como Mecanismo de Dissipação*, Tese de Doutorado, Unicamp, 1996.
- [55] V.S. Anishchenko, T.E. Vadivasova, G.A. Okrokovtshkov, G.I. Strelkova, *Physica A* 325, 199, 2003.
- [56] R. Kubo, M. Toda, N. Hashitsume, *Statistical Physics II*, Springer, Heidelberg, 1985.
- [57] M. A. Marchiori, *Banhos Caóticos Finitos como Reservatórios Termicos*, Tese de Doutorado, Unicamp, 2011.

- [58] Carnegie, A. e Percival, I. C. *J. Physica A.* 17, 801, 1984.
- [59] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran*, Cambridge University Press, USA, 1992.
- [60] Pathria, R. K., *Statistical Mechanics*, Butterworth-Heinemann, Second Edition, 1996.
- [61] D. M. Flemming, M. B. Gonçalves, *Cálculo A: Funções, Limites, Derivação, Integração*, Editora da UFSC, Florianópolis, 1992.
- [62] J. C. Xavier, W.T. Strunz, M. W. Beims, *Dissipative dynamics in a finite chaotic environment: relation between damping rate and Lyapunov exponent*. Submetido para publicação.
- [63] E. G. Altmann, H. Kantz, *Physical Review E*, 71, 056106, 2005.
- [64] W. E. Boyce e R. C. Di Prima. *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno*, Guanabara Koogan S. A., 1994.
- [65] J. L. Boldrini, S. I. R. Costa, V. L. Figueiredo, H. G. Wetzler, *Algebra Linear*, 3a Ed., Harbra, São Paulo, 1980.
- [66] Gradshteyn, I. S. e Ryzhik, L. M., *Table of Integrals, Series, and Products*, Academic Press, 1980.