



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
INSTITUTO DE FÍSICA
Programa de Pós-Graduação em Física

Dissertação de Mestrado

**Distribuições de probabilidade em sistemas
Hamiltonianos: Hénon-Heiles e gases do tipo
Lennard-Jones**

Daniel Prado Martins Fernandes

Salvador - 2018

UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA

INSTITUTO DE FÍSICA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO

**Distribuições de probabilidade em sistemas
Hamiltonianos: Hénon-Heiles e gases do tipo
Lennard-Jones**

Daniel Prado Martins Fernandes

Orientador: Dr. Ernesto Pinheiro Borges

Dissertação apresentada ao programa de pós-graduação do Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia (UFBA) como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Física.

Salvador - 2018

Resumo

A descrição estatística de sistemas dinâmicos, mais especificamente sistemas hamiltonianos com muitas partículas, como um gás ideal, é povoada de distribuições Gaussianas. A origem destas distribuições está muito ligada à hipótese do caos molecular, formulada por Boltzmann. Estes sistemas caóticos, ou mais precisamente, fortemente caóticos, são caracterizados por expoentes de Lyapunov positivos, e apresentam divergência exponencial de órbitas arbitrariamente próximas. Existem sistemas cuja divergência de órbitas arbitrariamente próximas é mais lenta que uma relação exponencial, — assumindo tipicamente a forma de leis de potência —, por conta de correlações espaciais de longo alcance. O expoente de Lyapunov para estes sistemas resulta nulo, e este regime é dito fracamente caótico. Distribuições não Gaussianas, particularmente q -Gaussianas, têm sido observadas em diferentes sistemas que apresentam caos fraco, sejam eles dissipativos, como o mapa logístico, ou conservativos, como o mapa padrão. Neste trabalho, analisamos secções de Poincaré do Hamiltoniano de Hénon-Heiles. Para energias baixas $E \leq 1/12$ as secções apresentam-se totalmente povoadas por órbitas regulares. Para $1/12 < E \leq 1/6$, temos uma mistura de regiões de órbitas regulares e caóticas. Encontramos Gaussianas para condições iniciais provindas de regiões de caos forte, e distribuições q -Gaussianas para aquelas condições iniciais em regiões de órbitas regulares. Este cenário é similar ao recentemente encontrado no mapa padrão. Estas distribuições aparecem apenas quando se considera o tempo discretizado segundo secções de Poincaré. Também investigamos através de dinâmica molecular o comportamento de um gás bidimensional do tipo Lennard-Jones ($V(r) \propto r^{-\alpha}$, sendo r a distância entre pares de moléculas). O parâmetro α regula o alcance da interação. O sistema é dito de longo alcance quando $0 < \alpha < 2$, quando há ocorrência de calor específico negativo para uma determinada faixa de energia. Examinamos as distribuições dos momentos para estas faixas com o objetivo de verificar a ocorrência da quebra de ergodicidade.

Lista de Figuras

1.1	Evolução temporal da energia mecânica total do oscilador harmônico 1.11. Condição inicial: $x = 1$; $p_x = 0$. Passo utilizado: $\Delta = 0,1$	11
2.1	Computador Royal McBee LGP-30, mesmo modelo que o utilizado por Lorenz para simular o clima.	12
2.2	Secção de Poincaré. Fonte: Ott [27]	14
2.3	Divergência entre duas órbitas inicialmente próximas. Fonte: Ott [27]	16
2.4	Ilustração da renormalização periódica da órbita perturbada. Fonte: [4]	17
2.5	Triângulo de Sierpinski e Samambaia de Barnsley.	17
2.6	Conjunto de Cantor	18
3.1	Distribuições q -Gaussianas para alguns valores de q . Nesta escala mono-log, uma Gaussiana se apresenta como uma parábola (linha pontilhada).	26
3.2	Na região de interação de longo alcance ($0 \leq \alpha/d \leq 1$) existe três classes de variáveis termodinâmicas: as que escalam com \tilde{N} nomeadas de pseudointensivas; aquelas que escalam com $N\tilde{N}$ denominadas pseudoextensivas; e as extensivas que escalam com N . Para interações de curto alcance ($\alpha/d > 1$) recupera-se as duas classes usuais que aparecem nos livros de termodinâmica. As variáveis pseudointensivas se tornam intensivas (independentes de N), e as pseudoextensivas se unem com as extensivas, gerando um único ramo extensivo. (Figura adaptada de [40])	28
3.3	Conjectura de Tsallis para o equilíbrio termodinâmico. Fonte: Borges [7]	29
4.1	Potencial de Hénon-Heiles (eq. (4.1)).	32
4.2	Erro relativo na energia total na integração numérica do sistema HH. (a) Comparação entre a evolução temporal dos erros relativos para os integradores Runge-Kutta de quarta ordem (curva preta) e Yoshida (curva vermelha). Condição inicial: $E = 1/8$, $x = 0$, $y = -0,25$, $p_y = 0$. (b) Erro relativo em função do passo de integração, para o integrador Yoshida. Curva preta: $\lambda = 0$; curva vermelha: $\lambda > 0$	33
4.3	Trajatórias com $E = 1/8$, para as condições iniciais: $x = 0$, $y = 0,1$, $p_y = 0$ (figuras da esquerda) e $x = 0$, $y = -0,25$, $p_y = 0$ (figuras da direita). Integração realizadas até $t = 500$. Linha superior: espaço das posições ($x-y$) Linha inferior: espaço dos momentos (p_x-p_y).	34
4.4	Evolução temporal do expoente de Lyapunov para as mesmas condições iniciais utilizadas na figura 4.3, energia $E = 1/8$: (a) caso quase-periódico ($x = 0$, $y = 0,1$, $p_y = 0$); (b) caso caótico ($x = 0$, $y = -0,25$, $p_y = 0$);	35

4.5	(a) Evolução temporal do SALI, para as condições iniciais com energia $E = 1/8$: $(x = 0, y = 0, p_y = 0)$; $(x = 0, y = -0,25, p_y = 0)$; em preto e vermelho respectivamente. (b) órbita de condição inicial $(x = 0, y = -0,25, p_y = 0)$. Ajuste linear (linha roxa). Decaimento exponencial $y = \ln(e^{\lambda t})$ (linha verde), onde λ é o expoente de Lyapunov com valor: $\lambda = 0,04359$ o mesmo que consta na figura 4.4.	36
4.6	Secção de Poincaré para diversas energias. A proporção da área ocupada por órbitas caóticas diminui com o aumento da energia.	38
4.7	Mapa de cores com $E = 1/8$ para (a) expoente de Lyapunov; (b) SALI. Escala de cores crescente do preto para o amarelo na figura (a), e decrescente na figura (b).	42
4.8	Mapa de cores para expoente de Lyapunov para diversos valores de energia. Regiões na cor preta correspondem a condições iniciais que levam à órbitas quase-periódicas, e as cores laranja e amarelo indicam movimento caótico. . .	43
4.9	Número relativo de condições iniciais com expoente de Lyapunov maior que o de corte, $N(\lambda > \lambda_{\text{corte}})$, em função do λ_{corte} . As linhas tracejadas correspondem aos pontos de corte, λ_- e λ_+ , utilizados para a energia $E = 1/8$	44
4.10	Número de vezes que a seção de Poincaré (Ω) é cruzada em ambos os sentidos $p_x > 0$ e $p_x < 0$, no intervalo de tempo $t = 2 \times 10^4$ (2×10^6 passos de integração com passo de integração de 10^{-2}) para a energia $E = 1/9$. Órbitas caóticas ($\lambda > \lambda_+$): vermelho; órbitas quase-periódicas ($\lambda < \lambda_-$): preto.	45
4.11	Detalhe da figura 4.10 para órbitas caóticas. (a) representação log-linear; (b) abscissa com valor centralizado do quadrado do número de cruzamentos, ordenada em escala logarítmica. Detalhe: região central.	46
4.12	Diagrama da variável p_y em função da energia. Os valores de p_y foram tomados sobre a seção de Poincaré. $M = 2^x$	47
4.13	Densidade de probabilidade da variável δ_{p_y} para a energia $E = 1/9$. Condições iniciais tomadas na região caótica. Considerados ambos os sentidos $p_x > 0$ e $p_x < 0$. $N = 21999$ condições iniciais com tempo convencional fixo, $t_F = 2 \times 10^6$ passos de integração. Curva vermelha corresponde ao ajuste de uma distribuição gaussiana, eq. (4.23), com $\beta_1 = 0,014$. (a) escala mono-log, quando uma gaussiana se apresenta como uma parábola; (b) abscissa com $(\delta_{p_y})^2$, e ordenada com o logaritmo natural da densidade de probabilidade, quando uma gaussiana se apresenta como uma linha reta.	48
4.14	Densidade de probabilidade para variável δ_{p_y} para a energia $E = 1/9$. Condições iniciais tomadas na região quase-periódica. Considerados ambos os sentidos $p_x > 0$ e $p_x < 0$. $N = 46819$ condições iniciais com tempo convencional fixo, $t_F = 2 \times 10^6$ passos de integração. Curva vermelha corresponde ao ajuste de uma distribuição q -gaussiana, eq. (4.24), com $q = 1.41$ e $\beta_q = 0.245$. (a) escala mono-log; (b) abscissa com $(\delta_{p_y})^2$, e ordenada com o q -logaritmo da densidade de probabilidade. Uma q -gaussiana se apresenta como uma linha reta nesta representação desde que o valor do parâmetro q esteja devidamente ajustado (no caso, $q = 1.41$).	49

4.15	Densidade de probabilidade para a variável δ_{p_y} para a energia $E = 1/9$. Condições iniciais tomadas em todo espaço de fases. Considerados ambos os sentidos $p_x > 0$ e $p_x < 0$. $N = 68818$ condições iniciais com tempo convencional fixo, $t_F = 2 \times 10^6$ passos de integração. Curva vermelha corresponde ao ajuste da combinação linear entre uma gaussiana e uma q -gaussiana, eq. (4.26). Valores dos parâmetros indicados na figura. Painel principal: escala mono-log; Detalhe: ampliação da parte central, na mesma escala.	50
4.16	Densidade de probabilidade para a variável δ_{p_y} para a energia $E = 1/9$. Condições iniciais tomadas em todo espaço de fases. Considerados ambos os sentidos $p_x > 0$ e $p_x < 0$. $M = 3\,058\,139$ condições iniciais, com tempo convencional fixo, $t_F = 2 \times 10^6$ passos de integração (a legenda da figura usa N_{ini} em vez de M , e T em vez de t_F , e apresenta valor aproximado de M). Painéis (a)–(d): sucessivas ampliações da mesma distribuição.	51
4.17	Histogramas (não normalizados) para a variável δ_{p_y} para a energia $E = 1/8$. Condições iniciais tomadas na região caótica. Considerados ambos os sentidos $p_x > 0$ e $p_x < 0$. $M = 1\,622\,347$ condições iniciais, com tempo natural fixo $N = 2^{20}$ (a legenda da figura usa N_{ini} em vez de M , e τ em vez de N). (a) escala log-linear; (b) abscissa com $(\delta_{p_y})^2$, e ordenada com o logaritmo do histograma. Detalhe de (b): ajuste de uma gaussiana ($Be^{-A(\delta_{p_y})^2}$, na notação da legenda) para a porção inicial dos dados.	52
4.18	Histogramas (não normalizados) para a variável δ_{p_y} para a energia $E = 1/8$. Condições iniciais tomadas na região quase-periódica. Considerados ambos os sentidos $p_x > 0$ e $p_x < 0$. $M = 966\,106$ condições iniciais, com tempo natural fixo $N = 2^{20}$ (a legenda da figura usa N_{ini} em vez de M , e τ em vez de N). (a) escala log-linear; (b) ampliação da figura (a), detalhe com ampliação adicional. (c) abscissa com $(\delta_{p_y})^2$, e ordenada com o logaritmo do histograma. Detalhe de (c): ampliação do painel principal.	52
4.19	Histograma (não normalizado) para a variável δ_{p_y} para a energia $E = 1/8$. Condições iniciais tomadas em todo espaço de fases. Considerados ambos os sentidos $p_x > 0$ e $p_x < 0$. $M = 2\,690\,930$ condições iniciais, com tempo natural fixo $N = 2^{20}$ (a legenda da figura usa N_{ini} em vez de M , e τ em vez de N). em escala log-linear. Detalhe com ampliação da parte central.	53
4.20	Densidades de probabilidade para a variável δ_{p_y} para a energia $E = 1/9$, avaliadas para o tempo convencional (<i>clock time</i>). Ordenada em escala logarítmica. Primeira coluna: órbitas caóticas; segunda coluna: órbitas quase-periódicas; terceira coluna: espaço de fases completo. Linha superior: abscissa com δ_{p_y} ; Linha inferior: abscissa com $(\delta_{p_y})^2$ (as legendas das figuras usam N_{ini} em vez de M , e T em vez de t_F).	53
5.1	Potencial tipo Lennard-Jones com $\alpha = 6$ e $\eta = 12$. A linha pontilhada vertical corresponde ao raio da partícula (σ). O potencial é repulsivo, para $r < r_{min}$ e atrativo para $r > r_{min}$. Quando $r_{ij} \rightarrow \infty$ o potencial $V(r_{ij})$ tende a zero, para $\alpha \neq 0$	55
5.2	Condições iniciais para as posições e momentos.	57
5.3	Desvio relativo da energia em função do:(a) número de partículas N ; (b) passo de integração ΔT em escala linear e log-log (figura interna); (c) energia por partícula E/N	58

5.4	Evolução temporal da energia cinética média por partícula para uma interação de curto alcance, para diferentes valores de energia E/N . Para cada energia foram realizadas 10 simulações, com $\alpha = 6$, $N = 406$, $\rho = 10^{-2}$	59
5.5	Evolução temporal da energia cinética média por partícula para uma interação de longo alcance, para diferentes valores de energia E/N . Para cada energia foram realizadas 10 simulações, com $\alpha = 1$, $N = 406$, $\rho = 10^{-2}$	60
5.6	Curva calórica para: (a) curto alcance ($\alpha = 6$); (b) longo alcance ($\alpha = 1$).	61
5.7	(a) Proporção entre energia potencial U e a energia total E em função E/N ; (b) Energia potencial em função da energia total.	62
5.8	Relação da curva calórica com o número de partículas, para $\alpha = 1$ e $\rho = 0,01$. (a) Curva calórica para diferentes valores de N . (b) Curva colapsada, E/N escalando com $N^{0,0754}$ e $\langle k \rangle / N$ com $N^{0,0858}$. Gráfico interno: Energia crítica (E_{crit}) em função do número de partículas N (escala log-log).	63
5.9	(a) Energia crítica (E_{crit}), círculos pretos, e energia potencial da configuração inicial (U_0), quadrados vermelhos, em função do número de partículas N . Os triângulos verdes representam a energia crítica não deslocada ($E_{\text{crit}} + U_0$), que é igual a $-0,038$ para qualquer N . (b) Curva calórica com energia não deslocada ($E/N + U_0$).	63
5.10	Curvas calórica para diferentes densidades.	64
5.11	Expoente de Lyapunov em função do tempo, com $\alpha = 1$ e $E = 0.2$. (a) 10 realizações (cada realização está representada por uma cor) com diferentes condições iniciais dos momentos p_i . (b) Média das 10 realizações ilustrada em (a).	65
5.12	Expoente de Lyapunov ($\langle \lambda \rangle$) em função da Energia por partícula com $N = 105$, $\rho = 0,01$, para: (a) $\alpha = 6$; (b) $\alpha = 1$	65
5.13	Distribuição do momento p_x no instante $t = 5 \times 10^4$, para uma interação de curto alcance ($\alpha = 6$). (a) Escala linear-log com p_x no eixo da abscissa, (b) com abscissa p_x^2	66
5.14	Distribuição do momento p_x no instante $t = 10^4$, para uma interação de longo alcance ($\alpha = 1$). (a) Escala linear-log com p_x no eixo da abscissa, (b) com abscissa p_x^2	67
5.15	Distribuição do momento p_x , com $\alpha = 1$ e $E = 0,7$, no instante $t = 10^6$, obtida com média de 10 realizações. (a) Ajuste gaussiano. (b) Curva Linearizada. No gráfico linear alguns pontos da simulação estão sobrepostos devido a simetria da distribuição.	67
5.16	Distribuição temporal do momento p_x , com $\alpha = 1$ e $E = 0,7$. (a) Ajuste gaussiano. (b) Curva Linearizada. No gráfico linear alguns pontos da simulação estão sobrepostos devido a simetria da distribuição.	68

Sumário

Lista de Figuras	1
Sumário	5
1 Introdução	7
1.1 Sistemas Hamiltonianos	8
1.2 Integração Numérica Simplética	9
2 Tópicos de Caos e Fractais	12
2.1 secção de Poincaré	13
2.2 Sensibilidade às Condições Iniciais	15
2.2.1 Expoente de Lyapunov	15
2.3 Dimensão Fractal	17
3 Mecânica Estatística não Extensiva	20
3.1 Entropia de Tsallis	20
3.2 Otimização S_q	23
3.3 Escalonamento de Sistemas Não Extensivos	26
3.4 Conjectura do equilíbrio termodinâmico de Tsallis	28
4 Potencial de Hénon-Heiles	31
4.1 O Potencial de Hénon-Heiles	31
4.2 Dinâmica das órbitas	33
4.3 Secção de Poincaré	36
4.4 Procedimentos Numéricos	39
4.5 Resultados	42
5 Potenciais tipo Lennard-Jones	54
5.1 Procedimentos	56
5.1.1 Ajuste das condições iniciais	56
5.2 Resultados	58
5.2.1 Evolução temporal da energia cinética	58
5.2.2 Curva calórica	61
5.2.3 Expoente de Lyapunov	64
5.2.4 Distribuição do Momento Linear	66
6 Conclusões	69
A Algoritmo Hénon-Heiles	71

B Unidades reduzidas	72
Referências Bibliográficas	74

Capítulo 1

Introdução

Esta dissertação se dedica a uma análise de distribuições de probabilidade em dois sistemas Hamiltonianos, um de baixa dimensionalidade, — o sistema Hénon-Heiles —, e um de alta dimensionalidade, — um gás tipo Lennard-Jones. Os três primeiros capítulos da dissertação, abordam conceitos preliminares que serviram de base para a análise dos sistemas Hamiltonianos tratados nos capítulos 4 e 5. A escolha da ordem dos capítulos 4 e 5 foi tomada com base na dimensionalidade do sistema, da menor dimensionalidade à maior. No capítulo 4 abordamos o sistema de Hénon-Heiles, de baixa dimensionalidade, e no 5 o sistema com potencial tipo Lennard-Jones, de alta dimensionalidade.

No capítulo 1 apresentamos as equações canônicas de movimento e discutimos a utilização de métodos numéricos para integrá-las. Introduzimos, inicialmente, os métodos de integração de Euler e de Runge-Kutta de quarta ordem. Mostramos, por meio do exemplo de um oscilador harmônico unidimensional, que estes métodos não preservam a estrutura dos sistemas Hamiltonianos, uma vez que a energia não é conservada. Em seguida apresentamos um integrador capaz de preservar tal estrutura, o integrador simplético de Yoshida de quarta ordem. Este integrador foi utilizado na realização das simulações discutidas nos capítulos 4 e 5.

No capítulo 2 é feita uma introdução ao caos determinístico e a dimensão fractal. Iniciamos o capítulo com uma abordagem histórica, onde se narra brevemente o desenvolvimento do estudo dos sistemas caóticos. Na sequência tratamos de duas técnicas (secção de Poincaré e expoente de Lyapunov) que permitem classificar o sistema quanto a sua caoticidade. Ainda neste capítulo, expomos a ideia de dimensão fractal, por sua relevância na teoria do caos, uma vez que os gráficos dos processos caóticos são fractais.

No capítulo 3 abordamos a mecânica estatística não extensiva. Apresentamos a entropia de Tsallis (S_q) e discutimos a questão de sua extensividade e aditividade. Em seguida, mostramos as distribuições conhecidas como q -Gaussianas, que podem ser obtidas por meio da extremização da entropia S_q , quando sujeita a determinados vínculos. Discutimos ainda duas questões ligadas a potenciais de longo alcance (como o analisado no capítulo 5): (i) a questão do fator de escala \tilde{N} responsável por tornar extensiva a energia do sistema; (ii) a questão da conjectura de Tsallis do equilíbrio termodinâmico dos sistemas com potencial de longo alcance. Esta conjectura diz a respeito da não comutatividade dos limites termodinâmicos, e da possível existência de dois patamares. O primeiro patamar é de equilíbrio metaestável, descrito pela mecânica estatística não extensiva, e o outro de equilíbrio estável, compatível com a estatística de Boltzmann e Gibbs.

No capítulo 4 estudamos o sistema de Hénon-Heiles. Este sistema apresenta, para determinada faixa de energia, coexistência de regiões de órbitas caóticas e quase-periódicas. Mostramos exemplos do comportamento destes dois tipos de órbitas no espaço de fases, e sua

caracterização por meio do expoente de Lyapunov, SALI (Smaller Aligment Index) e da secção de Poincaré. A conteúdo original desta dissertação é a análise das distribuições do sistema de Hénon-Heiles. De início analisamos as distribuições de órbitas caótica e quase-periódicas separadamente. Ao tomarmos somente condições iniciais caóticas, a distribuição é ajustada por uma Gaussiana, em sua parte central. Para o conjunto de condições iniciais formado somente por órbitas quase-periódicas, a distribuição pode ser ajusta por uma q -Gaussiana. Ao tomarmos as órbitas caóticas e quase-periódica juntas, obtemos uma distribuição que é composição linear da Gaussiana com a q -Gaussina. Este resultado é similar ao obtido no artigo [39] para o mapa padrão. No apêndice A, encontra-se o fluxograma do algoritmo utilizado nas simulações.

No capítulo 5 estudamos, via simulação de Dinâmica Molecular, um sistema com N partículas, com potencial entre pares do tipo Lennard-Jones. Este potencial possui um termo repulsivo e outro atrativo. O termo atrativo decai com a distância entre pares de partículas (r), na forma $V(r) \propto r^{-\alpha}$, onde o parâmetro α regula o alcance da interação. Se $\alpha/d \leq 1$, o potencial é dito de longo alcance, e de curto alcance para outros valores de α/d , sendo d a dimensão espacial do sistema. Analisamos para este sistema: a evolução temporal da energia cinética; curvas calóricas, onde foram encontradas regiões de calor específico negativo; expoente de Lyapunov e distribuições de momentos.

A estrutura geral da dissertação se aproxima de [11]. Ali foram tratados também o sistema Hénon-Heiles e gases tipo Lennard-Jones, de um modo geral; nosso trabalho avalia as distribuições. O capítulo dedicado aos gases tipo Lennard-Jones segue [7].

1.1 Sistemas Hamiltonianos

A dinâmica dos sistemas Hamiltonianos é completamente especificada por uma única função, o Hamiltoniano, $\mathcal{H}(q_k, p_k, t)$. Onde q_k e p_k são, respectivamente, as coordenadas e momentos generalizados, de um sistema com k graus de liberdade.

A função Hamiltoniana contém toda a informação da dinâmica do sistema. As equações do movimento expressas em termos de coordenadas e momentos generalizados são dadas por:

$$\dot{q}_k = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_k}, \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_k}, \quad (1.1)$$

as equações acima são conhecidas como equações de Hamilton ou equações canônicas do movimento.

A variação do Hamiltoniano com o tempo é dada por:

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_k} \dot{p}_k \right) + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_k} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_k} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_k} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_k} \right) + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t}, \quad (1.2)$$

logo, o termo entre parênteses é nulo, assim,

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t}, \quad (1.3)$$

\mathcal{H} é uma quantidade conservada, caso ela não dependa explicitamente do tempo. E é uma constante de movimento, na condição de \mathcal{H} representar a energia total do sistema. A discussão, nesta dissertação, restringi-se a sistemas conservativos.

A importância do formalismo Hamiltoniano vai além do fornecimento das equações de movimento. Ele também é de fundamental importância para os fundamentos da Mecânica Estatística e da Quântica.

1.2 Integração Numérica Simplética

A modelagem de fenômenos naturais por meio de equações diferenciais, recai frequentemente em equações não integráveis que requerem resolução numérica. O método mais simples de integração numérica é o de Euler. Neste método, dado o problema de valor inicial:

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y), \quad \text{com } y(t_0) = y_0, \quad (1.4)$$

obtêm-se uma solução aproximada de $y(t)$ à $y(t + \Delta t)$, na forma

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t f(t_n, y_n), \quad (1.5)$$

onde Δt é o chamado passo de integração assumido pequeno, mas não infinitesimal.

Ainda que o método desenvolvido por Euler tenha inaugurado a integração numérica, foi o método de Runge-Kutta o responsável por sua popularização, mais especificamente o Runge-Kutta de quarta ordem (RK4). No RK4 toma-se uma média ponderada dos valores de $f(t, y)$ em diferentes pontos do intervalo $t_n \leq t \leq t_{n+1}$, enquanto que o método de Euler utiliza um único valor, $f(t_n, y_n)$. A fórmula da aproximação do RK4 é:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{6}(k_{n1} + 2k_{n2} + 2k_{n3} + k_{n4}), \quad (1.6)$$

onde

$$k_{n1} = f(t_n, y_n), \quad (1.7)$$

$$k_{n2} = f(t_n + 1/2\Delta t, y_n + 1/2\Delta t k_{n1}), \quad (1.8)$$

$$k_{n3} = f(t_n + 1/2\Delta t, y_n + 1/2\Delta t k_{n2}), \quad (1.9)$$

$$k_{n4} = f(t_n + \Delta t, y_n + \Delta t k_{n3}), \quad (1.10)$$

são os incrementos no início do intervalo, no ponto central (k_{n2} e k_{n3}) e no fim do intervalo, respectivamente. A popularidade do RK4 deve-se ao fato dele ser de fácil implementação e gerar erros menores que o método de Euler.

Vimos na seção 1.1, que sistemas Hamiltonianos independentes do tempo conservam a energia. No entanto, métodos de integração como o de Euler e o RK4, quando aplicados a estes sistemas, não a conservam. Veja, por exemplo, o caso abordado por Yoshida em [49], do oscilador harmônico unidimensional de Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}(p^2 + q^2). \quad (1.11)$$

A solução exata da integral de movimento deste sistema é

$$\begin{pmatrix} q(\Delta t) \\ p(\Delta t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\Delta t) & \sin(\Delta t) \\ -\sin(\Delta t) & \cos(\Delta t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix},$$

o método de Euler fornece a solução:

$$\begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \Delta t \\ -\Delta t & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix},$$

que leva a um incremento de $(1 + \Delta t^2)$ na energia a cada passo de integração,

$$(p_{n+1}^2 + q_{n+1}^2) = (1 + \Delta t^2)(p_n^2 + q_n^2). \quad (1.12)$$

Já no RK4 ocorre um amortecimento artificial:

$$(p_{n+1}^2 + q_{n+1}^2) = \left(1 - \frac{1}{72}\Delta t^6 + \dots\right)(p_n^2 + q_n^2). \quad (1.13)$$

Este incremento (ou amortecimento) cresce de forma secular, tornando o resultado inaceitável quando se integra por um longo tempo. Estes métodos violam a conservação da energia, portanto deve-se utilizar algum outro método de integração. Uma alternativa são os integradores simpléticos. Eles são uma classe de métodos de integração numérica criados para tratar sistemas Hamiltonianos. Nesta dissertação faremos uso do integrador simplético de Yoshida de quarta ordem [48]. Dado o Hamiltoniano de energia cinética K e potencial V ,

$$\mathcal{H} = K(p) + V(q), \quad (1.14)$$

a fórmula do integrador de Yoshida pode ser escrita como,

$$q_i = q_{i-1} + \Delta t c_i \frac{\partial K}{\partial p}(p_{i-1}), \quad (1.15)$$

$$p_i = p_{i-1} - \Delta t d_i \frac{\partial V}{\partial q}(q_i), \quad (1.16)$$

c_i e d_i são coeficientes. O índice i varia de 1 até n , sendo n a ordem do integrador. Para um integrador de quarta ordem os coeficiente são:

$$\begin{aligned} c_1 &= c_4 = \frac{1}{2(2 - 2^{1/3})}, \\ c_2 &= c_3 = \frac{1 - 2^{1/3}}{2(2 - 2^{1/3})}, \\ d_1 &= d_3 = \frac{1}{2 - 2^{1/3}}, \\ d_2 &= -\frac{2^{1/3}}{2 - 2^{1/3}}, \\ d_4 &= 0. \end{aligned} \quad (1.17)$$

Os valores das posições e momentos após um passo de integração são dados por q_4 (eq.1.15) e p_4 (eq.1.16).

Veja na figura 1.1 a comparação entre RK4 e o integrador de Yoshida. O integrador de Runge-Kutta de quarta ordem decai a zero, ao passo que o integrador de Yoshida, de mesma ordem e com o mesmo passo de integração ($\Delta = 0,1$), consegue conservar a energia em uma determinada faixa. O integrador de Yoshida foi utilizado no capítulo 4 para realizar a simulação do sistema de Hénon-Heiles, e no capítulo 5 para o sistema com potencial tipo Lennard-Jones. Implementamos o integrador em linguagem Fortran ao analisarmos o sistema de Hénon-Heiles, e C++ no estudo do sistema tipo Lennard-Jones.

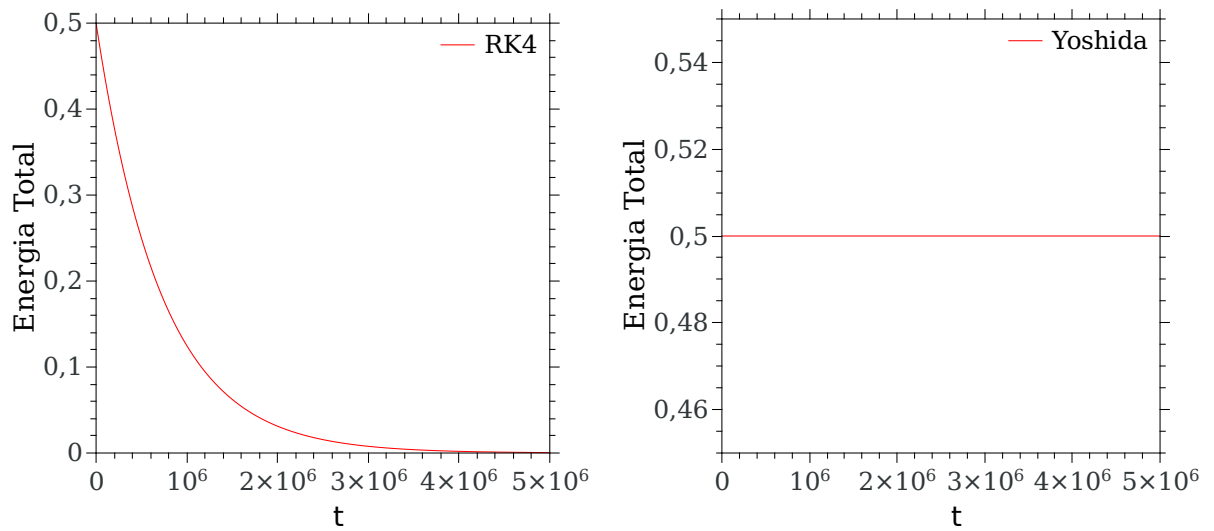


Figura 1.1: Evolução temporal da energia mecânica total do oscilador harmônico 1.11. Condição inicial: $x = 1$; $p_x = 0$. Passo utilizado: $\Delta = 0,1$.

Capítulo 2

Tópicos de Caos e Fractais

O estudo de sistemas caóticos tem sua origem no final do século XIX com os trabalhos do matemático francês Henri Poincaré sobre a dinâmica de 3 corpos. O problema de 2 corpos, *e.g.* sistema Sol-Terra, já havia sido resolvido por Newton em meados de 1600. Parecia que o problema de 3 corpos (ou n -corpos) seria uma simples extensão deste, no entanto ele se mostrou mais complicado do que aparentava. Grandes matemáticos buscaram uma solução, dentre eles destacam-se Euler e Lagrange, no entanto estes matemáticos encontraram apenas soluções particulares ou aproximadas para alguns casos. Poincaré seguiu uma abordagem diferente dos seus predecessores, em vez de procurar uma solução analítica ele buscou caracterizar o comportamento qualitativo no espaço de fase.

Embora tenha ocorrido grande progresso no início do século XX, foi a partir da década de 60, com o advento dos computadores modernos, o qual possibilitou o uso massivo de soluções numéricas, que os sistemas caóticos passaram a receber maior atenção. O escritor James Gleick [17], em um dos capítulos do seu livro "Caos - a Criação de uma Nova Ciência", narra a busca de Edward N. Lorenz, com auxílio do seu computador Royal McBee LGP-30 (veja fig.2.1), por um modelo meteorológico capaz de melhorar as previsões climáticas. Segundo Gleick, a maioria dos meteorologistas da época achavam que a previsão não passava de uma adivinhação. Foi neste contexto que Lorenz propôs seu modelo descrito por um sistema de equações diferenciais não lineares, que por meio de integração numérica simulavam o movimento do ar na atmosfera. Estas equações representavam fatores que influenciavam o clima, tal como: temperatura; pressão; velocidade do vento etc.

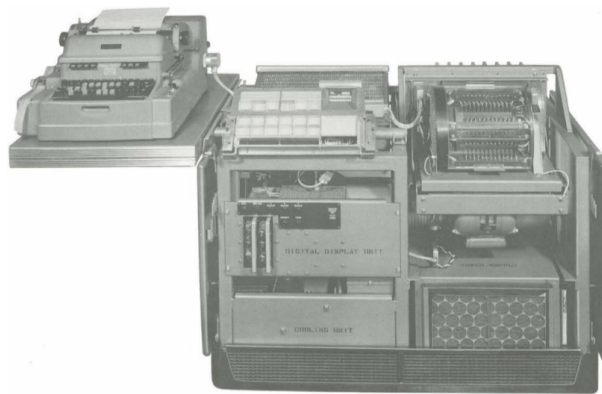


Figura 2.1: Computador Royal McBee LGP-30, mesmo modelo que o utilizado por Lorenz para simular o clima.

Certa vez, ao refazer uma simulação, Lorenz resolveu pegar um atalho. Para economizar tempo tomou como condição inicial um ponto intermediário impresso da simulação anterior. O resultado desta nova simulação deveria ser idêntico, mas o que Lorenz viu foi algo bem diferente. Apesar dos dados coincidirem no início, após um certo tempo eles divergiam a ponto de não possuírem mais nenhuma semelhança entre si. O seu modelo era determinístico, nenhuma das equações possuíam variáveis estocásticas, portanto não havia motivo para existir discrepância entre os resultados. Neste momento ele notou que a condição inicial que havia utilizado, impressa no papel, apresentava 3 casas decimais, enquanto que o valor armazenado na memória do computador e utilizado nas contas possuía 6 decimais. Esta pequena diferença na condição inicial foi suficiente para gerar resultados completamente díspares após certo tempo. Esta extrema sensibilidade às condições iniciais levou Lorenz ao entendimento de que previsões meteorológicas de longo prazo estão fadadas ao fracasso, pois jamais será possível conhecer todas as variáveis que influenciam o clima com uma precisão absoluta, por conta da própria natureza da medição. Sua descoberta foi sintetizada na frase de impacto: "O bater de asas de uma borboleta no Brasil pode desencadear um tornado no Texas". Por conta desta frase, hoje em dia esta sensibilidade às condições iniciais é conhecida, popularmente, como Efeito Borboleta. As próximas seções ilustram alguns métodos utilizados para caracterizar sistemas caóticos.

2.1 secção de Poincaré

Na maioria das vezes a análise do espaço de fases de sistemas contínuos é bem complicada. Uma maneira de simplificar, sem perder as principais características qualitativas do sistema, é reduzir o estudo do fluxo a um mapa¹. Uma forma de se obter o mapa é através da utilização da técnica chamada de método da secção de Poincaré.

Considere um sistema n -dimensional,

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \vdots \\ \frac{dx_n}{dt} = f_n(x_1, x_2, \dots, x_n). \end{cases} \quad (2.1)$$

Toma-se uma hiper-superfície Ω de dimensão $(n-1)$ no espaço de fase n -dimensional, tal que o fluxo no espaço de fase seja transversal a Ω . A esta hiper-superfície dá-se o nome de secção de Poincaré. O mapa é obtido tomando-se a sequência dos pontos de intersecção da trajetória com Ω , como ilustrado em fig.2.2. Se \vec{x}_k representa a k -ésima intersecção, então o mapa é definido por

$$\vec{x}_{k+1} = P(\vec{x}_k), \quad \vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n). \quad (2.2)$$

Ao evoluir a equação 2.1 por meio de integração numérica, depara-se com a dificuldade para encontrar os pontos de intersecção com a secção de Poincaré, pois dificilmente um ponto do passo de integração pertencerá a secção. Um artifício bastante empregado para obter a intersecção é a interpolação. Neste método, ao tomar uma superfície Ω definida por uma função $S(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$, que aqui, por simplicidade, adotaremos

$$S(x_1, x_2, \dots, x_n) = x_i - a \quad , \quad \text{com } a \text{ constante.} \quad (2.3)$$

¹Mapa é um sistema dinâmico que evolui no tempo de forma discreta.

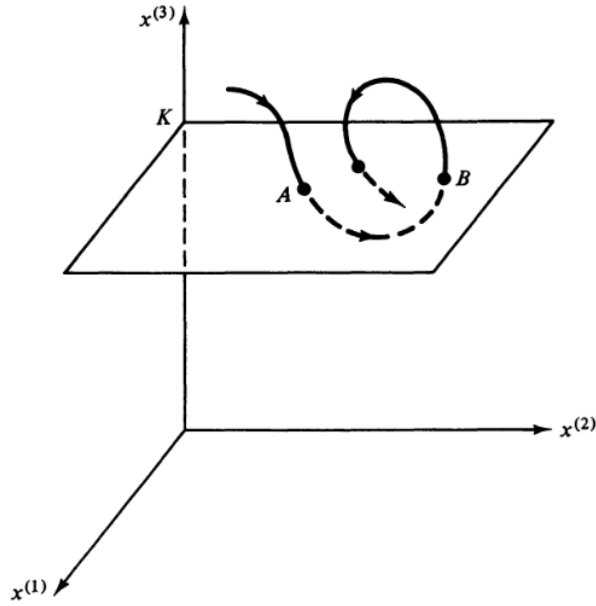


Figura 2.2: Secção de Poincaré. Fonte: Ott [27]

Avalia-se, a cada passo de integração, se a trajetória cruzou a secção de Poincaré, em outras palavras, se ocorreu mudança de sinal na eq.2.3 em relação ao passo anterior. Ao cruzar a secção, o ponto de intersecção é obtido por interpolação linear entre os dois últimos pontos.

A técnica descrita acima produz erros, mesmo quando utilizada uma interpolação de ordem mais alta. Em 1982, Hénon propôs um método que produz erros de ordem desprezível, quando comparado a interpolação. No artigo intitulado "*On the numerical Computation of Poincaré Maps*" [20] ele descreve como rearranjar o esquema de integração de tal maneira que um ponto de integração esteja exatamente em Ω . Para isso, efetua-se a permutação de coordenadas de modo que a equação 2.3 fique na forma

$$x_n - a = 0 \quad (2.4)$$

com o objetivo de converter x_n na variável independente, divide-se os $(n-1)$ primeiros termos da eq.2.1 pela última e inverte a última equação:

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dx_n} = \frac{f_1}{f_n} \\ \vdots \\ \frac{dx_{n-1}}{dx_n} = \frac{f_{n-1}}{f_n} \\ \frac{dt}{dx_n} = \frac{1}{f_n} \end{cases} \quad (2.5)$$

Com este novo arranjo do sistema, agora com x_n como variável independente, integrar de modo a obter exatamente o ponto de intersecção da órbita com a secção passa a ser uma tarefa trivial. Basta evoluir o sistema 2.1 até que a mudança de sinal seja detectada (passagem pela secção) e então realizar um único passo de integração (de tamanho $\Delta x_n = -S$) no sistema 2.5, o que leva a órbita exatamente para a superfície da secção. Depois retorna-se a equação 2.1 e repete-se o procedimento até cruzar novamente a secção.

Os sistemas 2.1 e 2.5 podem ser incorporados em um único. Para isto define-se τ como

variável independente atual, isto é $\tau = t$ para 2.1 e $\tau = x_n$ quando utiliza-se 2.5, e

$$\kappa = \frac{dt}{d\tau} \quad (2.6)$$

com o auxílio destas variáveis podemos reescrever os sistemas em uma única forma:

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{d\tau} = \kappa f_1 \\ \vdots \\ \frac{dx_n}{d\tau} = \kappa f_n \\ \frac{dt}{d\tau} = \kappa. \end{cases} \quad (2.7)$$

As equações de 2.1 e 2.5 passam a ser casos particulares deste sistema quando adota-se $k = 1$ e $k = 1/f_n$, respectivamente.

2.2 Sensibilidade às Condições Iniciais

A caracterização das órbitas por meio da secção de Poincaré é inviável para sistemas com muitos graus de liberdade, pois não é possível visualizar a dinâmica em um espaço de fase N -dimensional quando $N \geq 3$. A natureza ordenada ou caótica de um sistema com número arbitrário de graus de liberdade pode ser feita, alternativamente, por meio da análise da divergência de órbitas inicialmente próximas. Sistemas caóticos apresentam divergência exponencial de órbitas inicialmente próximas, o que resulta em uma de suas principais características: a extrema sensibilidade às condições iniciais. Vários métodos de caracterização de órbitas são baseados nesta divergência, talvez os mais populares sejam o expoente de Lyapunov e o SALI (Smaller Alignment Index) [35].

2.2.1 Expoente de Lyapunov

O expoente de Lyapunov é uma estimativa da taxa média de divergência ou convergência entre duas trajetórias inicialmente próximas. Considere uma órbita de referência que possui condição inicial $\mathbf{x}_1(0)$, e uma segunda órbita com condição inicial $\mathbf{x}_2(0) = \mathbf{x}_1(0) + \varepsilon(0)$, onde $\varepsilon(0)$ é a distância inicial entre as órbitas, arbitrariamente pequena. Evolui-se as órbitas até um dado instante t , como mostrado na figura(2.3). No instante t , a distância entre as órbitas será de $\varepsilon(t) = \mathbf{x}_2(t) - \mathbf{x}_1(t)$. A divergência exponencial apresentada por sistemas caóticos é representada por

$$|\varepsilon(t)| \propto e^{\lambda t}, \quad (2.8)$$

onde $|\varepsilon(t)|$ é a norma do vetor ε no instante t , e λ é o chamado expoente de Lyapunov, que é obtido pelo limite:

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{\varepsilon(0) \rightarrow 0} \frac{1}{t} \ln \frac{|\varepsilon(t)|}{|\varepsilon(0)|}. \quad (2.9)$$

Sistemas caóticos exibem $\lambda > 0$. Se $\lambda < 0$, o sistema possui um atrator, logo ele é dissipativo com órbita periódica estável. O caso limite $\lambda = 0$, segundo essa caracterização, mantém invariante a distância inicial entre as órbitas, neste caso o sistema é periódico ou quasi-periódico.

2

²Alguns autores, por exemplo Strogatz [37], intitulam as órbitas com $\lambda = 0$ de estabilidade neutra.

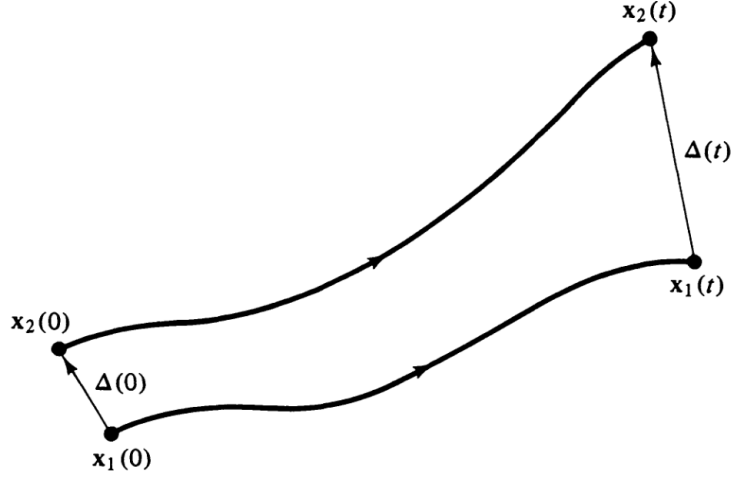


Figura 2.3: Divergência entre duas órbitas inicialmente próximas. Fonte: Ott [27]

Um sistema com um espaço de fase N -dimensional, possuirá N expoentes de Lyapunov, cada um referente a uma dimensão. O conjunto de todos expoentes, $\{\lambda_i\}$, é denominado de espectro de Lyapunov. Por definição, permuta-se o índice i de modo a resultar:

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \cdots \geq \lambda_n, \quad (2.10)$$

assim o maior expoente será λ_1 . Para tempos longos a divergência 2.8 será dominada assintoticamente por λ_1 , como mostrado na equação abaixo.

$$|\varepsilon(t)| = e^{\lambda_1 t} |\varepsilon_1(0)| \left(1 + \left(\frac{\varepsilon_2(0)}{\varepsilon_1(0)} \right)^2 e^{2(\lambda_2 - \lambda_1)t} + \dots + \left(\frac{\varepsilon_n(0)}{\varepsilon_1(0)} \right)^2 e^{2(\lambda_n - \lambda_1)t} \right)^{1/2} \approx e^{\lambda_1 t} |\varepsilon_1(0)|. \quad (2.11)$$

Portanto, basta que o maior expoente seja positivo para que haja caos. O expoente λ_1 é denominado de expoente de Lyapunov máximo, usualmente representado por λ_{max} . Nesta dissertação, nos concentramos no cálculo de λ_{max} , e, por parcimônia, vamos designá-lo simplesmente por λ .

Ao calcular o expoente de Lyapunov, via computação numérica, defronta-se com a dificuldade de lidar com o aumento exponencial de $|\varepsilon(t)|$, que pode acarretar *overflow* numérico. Esta dificuldade pode ser contornada por meio do método de Benettin, descrito em [5]. Neste método, fixa-se um número κ de iterações, a cada κ iterações a órbita perturbada é renormalizada. Em outras palavras, ela é substituída por uma nova com mesma direção, porém com uma distância estabelecida $|\varepsilon(0)|$, em relação a órbita fiducial. Este procedimento é repetido m vezes, como ilustrado na figura 2.4. Por fim, calcula-se λ por meio da expressão:

$$\lambda = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{m\kappa} \sum_{j=1}^m \ln \frac{|\varepsilon(j\kappa)|}{|\varepsilon(0)|}. \quad (2.12)$$

O limite $m \rightarrow \infty$ da equação 2.12 não é viável por meio de computação numérica. Todavia, como λ aproxima-se assintoticamente de um valor constante, o cálculo do expoente pode ser realizado até um instante t , tal que a curva se torne horizontal em um gráfico λ versus m .

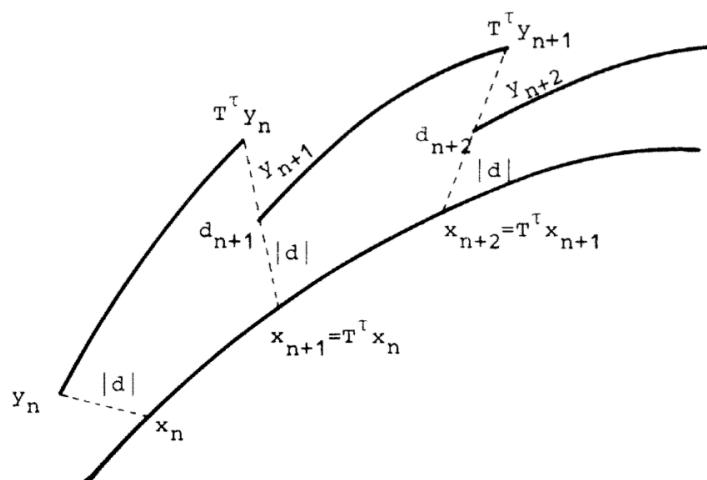
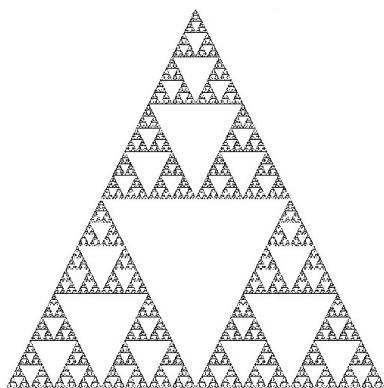


Figura 2.4: Ilustração da renormalização periódica da órbita perturbada. Fonte: [4]

2.3 Dimensão Fractal

O matemático Benoit Mandebrolt cunhou o termo fractal (do latim fractus, significa fração, quebrado) para descrever o conjunto de figuras geométricas que comumente apresentam autossimilaridade, complexibilidade e dimensão fracionada. Um objeto é dito autossimilar quando parte do objeto se parece com o todo em diferentes escalas, como no triângulo de Sierpinski e na samambaia de Barnsley (Figura 2.5).



Triângulo de Sierpinski



Samambaia de Barnsley

Figura 2.5: Triângulo de Sierpinkki e Samambaia de Barnsley.

Os objetos da geometria Euclidiana possuem dimensão topológica inteira: pontos têm dimensão zero; segmento de reta é unidimensional; superfície dimensão dois etc. Os fractais possuem formas mais complexas, contudo a dimensão topológica não a capta. A dimensão de Hausdorff surge como uma alternativa capaz de exprimir esta complexidade, podendo inclusive assumir valores fracionários. A função para o cálculo da dimensão de Hausdorff pode ser deduzida de modo intuitivo, como mostraremos a seguir. Uma linha de tamanho L pode ser medida a partir de segmentos de comprimento ε , logo, são necessários $N(\varepsilon)$ segmentos para

recobri-la,

$$N(\varepsilon) = \left(\frac{L}{\varepsilon}\right)^1. \quad (2.13)$$

De maneira análoga, para recobrir um quadrado de lado L são necessárias $N(\varepsilon)$ caixas,

$$N(\varepsilon) = \left(\frac{L}{\varepsilon}\right)^2, \quad (2.14)$$

e para um cubo:

$$N(\varepsilon) = \left(\frac{L}{\varepsilon}\right)^3. \quad (2.15)$$

Extrapolando estes resultados para um hipercubo D_0 -dimensional, temos:

$$N(\varepsilon) = \left(\frac{L}{\varepsilon}\right)^{D_0}. \quad (2.16)$$

A partir da eq.2.16 chegamos à expressão da dimensão de Hausdorff:

$$D_0 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\log N(\varepsilon)}{\log(L/\varepsilon)}, \quad (2.17)$$

onde $N(\varepsilon)$ é o número de hipercubos de lado ε necessários para cobrir o conjunto de pontos da figura. A fim de exemplificar, tomemos o conjunto de Cantor, cuja construção geométrica é realizada através das seguintes etapas:

- **Etapa 1** toma-se inicialmente um segmento de reta de comprimento $L = 1$;
- **Etapa 2** divide-se o segmento em 3 partes iguais;
- **Etapa 3** remove-se o terço central;
- **Etapa 3** repete-se n ($n \rightarrow \infty$) vezes o procedimento, a partir da etapa 2, para cada segmento restante, como mostrado na figura 2.6.

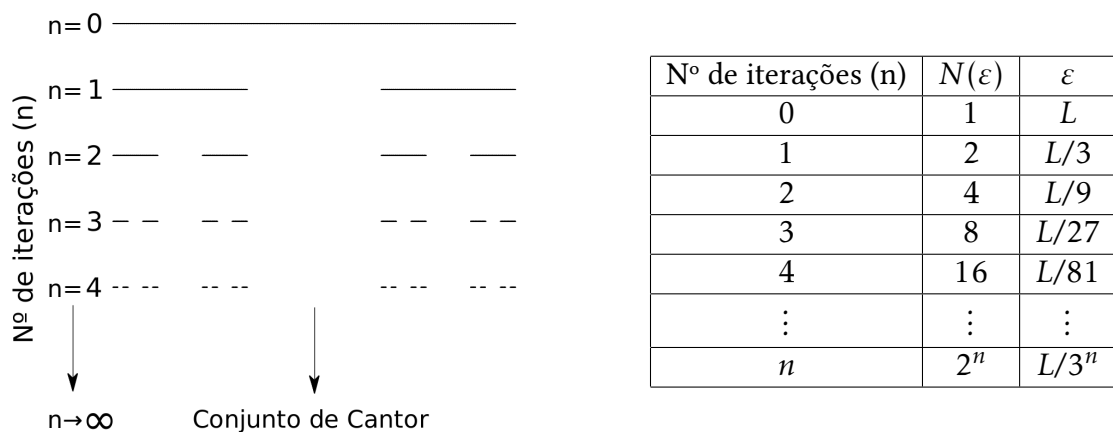


Figura 2.6: Conjunto de Cantor

A tabela ao lado da figura 2.6, mostra que $N(\varepsilon) = 2^n$ e $\varepsilon = 1/3^n$, onde n é o número de iterações, logo, tomar $\varepsilon \rightarrow 0$ na Eq.2.17 é equivalente a tomar $n \rightarrow \infty$, portanto a dimensão de Hausdorff do conjunto de Cantor é:

$$D_0 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\log 2^n}{\log 3^n} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log 2^n}{\log 3^n} \approx 0,63. \quad (2.18)$$

A Eq. 2.17 desempenha papel fundamental no estudo dos fractais, sendo utilizada por Mandelbrot [26] para defini-los como um conjunto no qual a dimensão de Hausdorff excede a dimensão topológica. Devido a essa íntima relação que possui com os fractais, a dimensão de Hausdorff é também conhecida como dimensão fractal, a partir daqui passaremos a utilizar este termo.

Box counting é um dos métodos numéricos que possibilita o cálculo da dimensão fractal, mesmo quando não se conhece a expressão analítica que viabiliza a aplicação direta da equação 2.17 (como a que foi obtida para o conjunto de Cantor). No método box counting recobre-se o espaço de fases com caixas de tamanho ε , e então conta-se o número de caixas $N(\varepsilon)$ que contenham pelo menos um ponto. Este procedimento deve ser realizado para diversos valores de ε . A dimensão fractal D_0 então é obtida como o coeficiente angular do gráfico $\log N(\varepsilon) \times \log 1/\varepsilon$.

Capítulo 3

Mecânica Estatística não Extensiva

3.1 Entropia de Tsallis

Por volta de 1870, o físico austríaco Ludwig Boltzmann apresentou ao mundo a sua célebre função¹ :

$$S = k \ln W. \quad (3.1)$$

A importância desta expressão reside no fato dela fazer a ponte entre as descrições macroscópica e a microscópica de sistemas constituídos por um número muito grande de elementos. A entropia S , que aparece no lado esquerdo da equação 3.1, é a grandeza macroscópica introduzida por Clausius, e conectada com as demais através das relações termodinâmicas. No seu lado direito, W representa o número de microestados acessíveis ao sistema compatíveis com um determinado macroestado, e k é uma constante positiva que define a unidade utilizada para a entropia (no Sistema Internacional de Unidades, p. ex., $k \approx 1,38 \times 10^{-23}$ J/K), chamada constante de Boltzmann.

A expressão para a entropia foi ampliada por Gibbs, redescoberta e utilizada por Shannon na teoria da informação:

$$S_{BG} = -k \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i = k \sum_{i=1}^W p_i \ln \frac{1}{p_i}. \quad (3.2)$$

Esta equação é conhecida como entropia de Boltzmann-Gibbs-Shannon, ou simplesmente entropia de Boltzmann-Gibbs, e aqui a representaremos por S_{BG} . Na Eq. 3.2, p_i simboliza a probabilidade correspondente a cada microestado. Quando os microestados são equiprováveis, isto é, $p_i = 1/W \quad \forall i$, a equação 3.1 é recuperada. S_{BG} , que é mais precisamente um funcional, exerce papel central na formalização da mecânica estatística (ME).

A ME é uma das grandes áreas da física, juntamente com a teoria eletromagnética de Maxwell e as mecânicas clássica, quântica e relativística. Devido o sucesso obtido ao ser aplicada a inúmeros sistemas, o formalismo de Boltzmann-Gibbs foi visto por muito tempo como o único possível para a ME. Contudo, como toda teoria, ela possui um domínio de validade, que depende das hipóteses tomadas em sua formulação. Tsallis expõe em seu livro [40] trechos encontrados na literatura que indicam alguns desses limites de validade. Dentre os sistemas que podem extrapolar o contexto da ME de Boltzmann-Gibbs, estão os que possuem uma ou mais das seguintes características: interação de longo alcance, memória de longa duração, quebra de ergodicidade, expoente de Lyapunov nulo, estrutura fractal ou multifractal.

¹Esta equação aparece, pela primeira vez, no livro Teoria do Calor, de Max Planck. Contudo esta equação é atribuída a Boltzmann, pois este claramente tinha conhecimento dela.

Diversas generalizações da entropia 3.2 foram realizadas no contexto da teoria da informação. A título de exemplo, temos a entropia de Rényi [29, 32] e a de Havrda e Charvát [19]. Em um artigo de 1988 [41], Constantino Tsallis introduziu, no âmbito da ME, a generalização:

$$S_q = -\frac{k}{1-q} \left[1 - \sum_{i=1}^W p_i^q \right]. \quad (3.3)$$

O parâmetro q é um número real, chamado de índice entrópico. No limite $q \rightarrow 1$ a Eq. 3.2 é recuperada, isto pode ser verificado facilmente via o procedimento de L'Hopital.

Com auxílio da função q -logaritmo [42], definida por:

$$\ln_q x \equiv \frac{x^{1-q} - 1}{1-q} \quad (x \in \mathbb{R}^+, \quad q \in \mathbb{R}), \quad (3.4)$$

pode-se reescrever a Eq.3.3, de modo a resultar uma forma análoga à 3.2, como segue:

$$S_q = k \sum_{i=1}^W p_i \ln_q \frac{1}{p_i}. \quad (3.5)$$

No caso de equiprobabilidade, esta expressão fica

$$S_q = -\frac{k}{1-q} [1 - W^{1-q}] = k \ln_q W. \quad (3.6)$$

A função $\ln_q x$ é uma generalização do logaritmo, pois o recupera para $q \rightarrow 1$. A função inversa do q -logaritmo, denominada q -exponencial, é dada por

$$e_q^x \equiv \exp_q(x) = \begin{cases} [1 + (1-q)x]^{1/(1-q)}, & q > 1, \\ [1 + (1-q)x]^{1/(1-q)} \theta\left(x + \frac{1}{1-q}\right), & q < 1. \end{cases} \quad (3.7)$$

Para $q < 1$, a função q -exponencial apresenta um corte (*cut-off*), representado pela função de Heaviside $\theta(x)$.

Várias generalizações foram realizadas no contexto da ME não extensiva ou inspiradas por ela, como a q -álgebra² e as distribuições q -Gaussianas, discutidas na seção 3.2. Tais generalizações são, por vezes, nomeadas de q -generalizações, devido a ubiquidade do parâmetro q . Assim como a entropia de Tsallis, elas recuperam, no limite $q \rightarrow 1$, os correspondentes casos usuais.

Uma das formas de generalizar uma teoria é por meio da substituição de um dos seus postulados por outro mais fraco. Foi esta a abordagem adotada por Tsallis. A entropia S_q viola a aditividade, expressa na primeira parte do terceiro postulado de Callen [10], assim enunciado:

Postulado III *The entropy of a composite system is additive over the constituent subsystems. The entropy is continuous and differentiable and is a monotonically increasing function of the energy.*

²Existem diferentes generalizações da álgebra usual, algumas delas denominadas q -álgebra; tratam-se, pois, de diferentes q -álgebras. Obviamente aqui abordamos aquela ligada ao formalismo associado à entropia S_q .

Ou seja, este postulado implica que a entropia de um sistema composto por dois subsistemas A e B probabilisticamente independentes (i.e., $p_{ij}(A+B) = p_i(A)p_j(B) \quad \forall(i, j)$), deve ser

$$S(A+B) = S(A) + S(B). \quad (3.8)$$

A entropia S_{BG} satisfaz esta relação, porém o mesmo não ocorre com a entropia de Tsallis, como mostrado abaixo.

De 3.3, temos

$$\begin{aligned} S_q(A+B) &= -\frac{k}{1-q} \left[1 - \sum_{i=1}^{W_A} \sum_{j=1}^{W_B} (p_i(A)p_j(B))^q \right] \\ &= -\frac{k}{1-q} \left[1 - \sum_{i=1}^{W_A} (p_i(A))^q \sum_{j=1}^{W_B} (p_j(B))^q \right], \end{aligned} \quad (3.9)$$

como

$$S_q(A) = -\frac{k}{1-q} \left[1 - \sum_{i=1}^{W_A} (p_i(A))^q \right] \implies \sum_{i=1}^{W_A} (p_i(A))^q = \frac{1-q}{k} S_q(A) + 1 \quad (3.10)$$

e

$$S_q(B) = -\frac{k}{1-q} \left[1 - \sum_{i=1}^{W_B} (p_i(B))^q \right] \implies \sum_{i=1}^{W_B} (p_i(B))^q = \frac{1-q}{k} S_q(B) + 1, \quad (3.11)$$

logo 3.9 fica

$$\begin{aligned} S_q(A+B) &= -\frac{k}{1-q} \left[1 - \left(\frac{1-q}{k} S_q(A) + 1 \right) \left(\frac{1-q}{k} S_q(B) + 1 \right) \right] \\ S_q(A+B) &= S_q(A) + S_q(B) + \frac{1-q}{k} S_q(A) S_q(B). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Portanto, a entropia de Tsallis é não aditiva com $q \neq 1$.

No início da formulação da mecânica estatística não extensiva, os conceitos de aditividade e de extensividade se confundiam. Efetivamente, para o caso de sistemas simples, descritos por BG, esses dois conceitos coincidem. Mas para algumas classes de sistemas, aditividade e extensividade se separam. Como visto anteriormente, uma variável X é aditiva se $X(A+B) = X(A) + X(B)$, porém para ser extensiva ela deve satisfazer:

$$0 < \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{|X|}{N} < \infty, \quad (3.13)$$

onde N é o número de elementos que constituem o sistema. No caso da entropia, se considerarmos um sistema cujo o número de microestado escale da forma

$$W \propto \mu^N, \quad \text{com } \mu > 1, \quad (3.14)$$

(e.g., para N dados independentes de 6 faces, temos $W = 6^N$), a entropia de Boltzmann-Gibbs resulta

$$S_{BG}(\mu^N) = Nk \ln \mu,$$

logo $S_{BG}(\mu^N) \propto N$, por conseguinte S_{BG} é extensiva, pois satisfaz 3.13. Já a entropia S_q , nesse caso, resulta

$$S_q = -\frac{k}{1-q} \left[1 - \mu^{N(1-q)} \right] \implies S_q \propto \mu^{N(1-q)}, \quad (3.15)$$

portanto, não extensiva para $q \neq 1$. No entanto, para sistemas correlacionados que possuem a forma

$$W \propto N^\rho, \quad \text{com } \rho > 0, \quad (3.16)$$

a entropia S_{BG} deixa de ser extensiva ($S_{BG} \propto \ln N$). Por outro lado,

$$S_q = -\frac{k}{1-q} \left[1 - N^{\rho(1-q)} \right] \quad (3.17)$$

passa a ser extensiva desde que $q = 1 - 1/\rho$ ($S_q \propto N$). Isto posto, a entropia de Tsallis é extensiva para sistemas cujo espaço de fases cresça com uma lei de potência, enquanto a entropia de Boltzmann-Gibbs é extensiva para sistemas cujo espaço de fases cresça exponencialmente com o número de constituintes. Em última análise, a forma funcional da entropia adequada a um determinado sistema é aquela que garante sua extensividade. A entropia S_q é não aditiva, pois satisfaz a equação (3.12), mas pode ser extensiva, de acordo com o sistema. A entropia de BG é aditiva, pois satisfaz a equação (3.8), mas é extensiva apenas para sistemas cujo espaço de fases obedeça a equação (3.14). Não é apropriado, portanto, dizer que a entropia S_q é não extensiva. Ela é, de fato, não aditiva. Mas a denominação mecânica estatística não extensiva é apropriada, por que a energia para sistemas com interações de longo alcance é não extensiva. Além disso, o uso se tornou tão difundido que ficou difícil adotar uma denominação talvez mais apropriada.

3.2 Otimização S_q

A distribuição de probabilidade que otimiza a entropia, qualquer que seja, depende do conjunto de restrições impostas ao sistema. Se o sistema é isolado, ou seja, no ensemble microcanônico, a única restrição é:

$$\sum_{i=1}^W p_i = 1. \quad (3.18)$$

Imposta a restrição da norma, eq.3.18, ao otimizar a entropia S_q obtém-se a equiprobabilidade $p_i = 1/W \forall i$, logo

$$S_q = k \ln_q W. \quad (3.19)$$

No chamado ensemble canônico, o sistema está em contato com um reservatório térmico por meio de uma parede diatérmica, mas fixa e impermeável, possibilitando assim a troca de energia entre o sistema e o reservatório. Nesta situação é imposta mais uma restrição, além da normalização 3.18. Na ME de Boltzmann-Gibbs esta restrição é expressa por meio do valor esperado (primeiro momento) da energia:

$$\langle E_i \rangle = \sum_{i=1}^W p_i E_i = U, \quad (3.20)$$

onde $\{E_i\}$ são os autovalores do Hamiltoniano do sistema e U a energia interna. Porém, na ME não-extensiva, a restrição 3.20 não se apresenta como a única possível. Diferentes generalizações do valor esperado foram propostas [13, 41, 44] com intuito de preservar algumas propriedades usuais. Estas generalizações serão discutidas brevemente com o objetivo de apresentar ao final da seção algumas distribuições que generalizam a Gaussiana via otimização da entropia de Tsallis.

No artigo [44] e no livro [40] são apresentadas três possíveis generalizações para o valor esperado. Vamos usar a mesma notação usada em [44], $U_q^{(1)}$, $U_q^{(2)}$, $U_q^{(3)}$ para representar os três casos.

O primeiro caso é o valor esperado usual, e foi também utilizado no artigo seminal da ME não-extensiva [41], de 1988:

$$\sum_{i=1}^W p_i E_i = U_q^{(1)}, \quad (3.21)$$

originando a distribuição

$$p_i^{(1)} = \frac{[1 - (q-1)\beta^{(1)}E_i]^{1/(q-1)}}{\sum_{j=1}^W [1 - (q-1)\beta^{(1)}E_j]^{1/(q-1)}} = \frac{e^{\beta^{(1)}E_i}_{2-q}}{\sum_{j=1}^W e^{\beta^{(1)}E_j}_{2-q}}. \quad (3.22)$$

Essa possibilidade origina alguns problemas:

- não permite uma conexão satisfatória com a termodinâmica no sentido de que nenhuma função de partição pode ser definida, o que não dependeria do parâmetro α , mas apenas do parâmetro $\beta_q^{(1)}$. Além disso $p_i^{(1)}$ não é invariante, para um $\beta_q^{(1)}$ fixo, em relação a uma mudança de zero da energia. Na verdade, $e_q^{a+b} \neq e_q^a e_q^b$ se $(q \neq 1)$, e, portanto, como está, não é possível fatorizar o novo zero da energia para que ele seja cancelado entre numerador e denominador.
- implica em divergências em alguns sistemas anômalos como a superdifusão anômala de Levy (lembrando que o segundo momento associado as distribuições de Levy divergem).

O segundo caso, o valor esperado fica generalizado de acordo com

$$\sum_{i=1}^W p_i^q E_i = U_q^{(2)}, \quad (3.23)$$

o que, após a otimização, origina a distribuição

$$p_i^{(2)} = \frac{[1 - (1-q)\beta^{(2)}E_i]^{1/(1-q)}}{Z_q^{(2)}}. \quad (3.24)$$

com a função partição generalizada dada por

$$Z_q^{(2)} = \sum_{j=1}^W [1 - (1-q)\beta^{(2)}E_j]^{1/(1-q)}. \quad (3.25)$$

No terceiro caso, o valor esperado fica generalizado por

$$\langle E_i \rangle_q = \sum_{i=1}^W P_i E_i = U_q^{(3)}, \quad (3.26)$$

onde são utilizadas as chamadas probabilidades *escort*, definidas em [3]:

$$P_i \equiv \frac{p_i^q}{\sum_{j=1}^W p_j^q} \quad (3.27)$$

A otimização da entropia S_q sujeita a este vínculo origina a distribuição:

$$p_i^{(3)} = \frac{[1 - (1 - q)\beta_q^{(3)}(E_i - U_q^{(3)})]^{1/(1-q)}}{Z_q^{(3)}} = \frac{e_q^{-\beta_q^{(3)}(E_i - U_q^{(3)})}}{Z_q^{(3)}} \quad (3.28)$$

com

$$\beta_q^{(3)} \equiv \frac{\beta^{(3)}}{\sum_{j=1}^W [p_j^{(3)}]^q} \quad (3.29)$$

e a função partição generalizada fica dada por

$$Z_q^{(3)} = \sum_{j=1}^W e_q^{-\beta_q^{(3)}(E_j - U_q^{(3)})}. \quad (3.30)$$

A generalização da Gaussiana decorre imediatamente da q -exponencial. A otimização da entropia S_q com as restrições de normalização, eq. 3.18, e segundo q -momento finito leva à q -Gaussiana. É possível usar o segundo momento generalizado de acordo com os casos (2) ou (3). A versão (2) foi utilizada em [8] [9]. A versão (3) foi utilizada em [14]. De um modo geral, a q -Gaussiana é definida por

$$p_q(x) = C_q e_q^{-\beta_q x^2} = \begin{cases} [1 - (1 - q)\beta_q x^2]^{\frac{1}{1-q}}, & q > 1 \\ [1 - (1 - q)\beta_q x^2]^{\frac{1}{1-q}}, & \text{se } |x| < \sqrt{\frac{1}{(1-q)\beta_q}} \\ 0, & \text{em outro caso} \end{cases} \quad q < 1$$

A constante C_q é responsável pela normalização da distribuição. β_q é o parâmetro de Lagrange associado ao segundo momento. Suas expressões variam de acordo com os casos (2) ou (3). Como, neste trabalho, usamos a q -Gaussiana como uma função ajustada aos dados, estas variáveis C_q e β_q (e também q) são obtidas pelo procedimento de otimização, e assim não necessitamos as expressões que as definem. Elas aparecem na Seção 4.5.

A figura 3.1 ilustra três casos de q -Gaussianas e a Gaussiana usual, para comparação. Para que a distribuição seja normalizável, $q < 3$. O caso $q = 2.9$ é apresentado com o objetivo de ilustrar que a curva vai se aproximando de uma distribuição uniforme em todo o domínio. No limite $q \rightarrow 3$, a curva vai se confundir com o eixo horizontal.

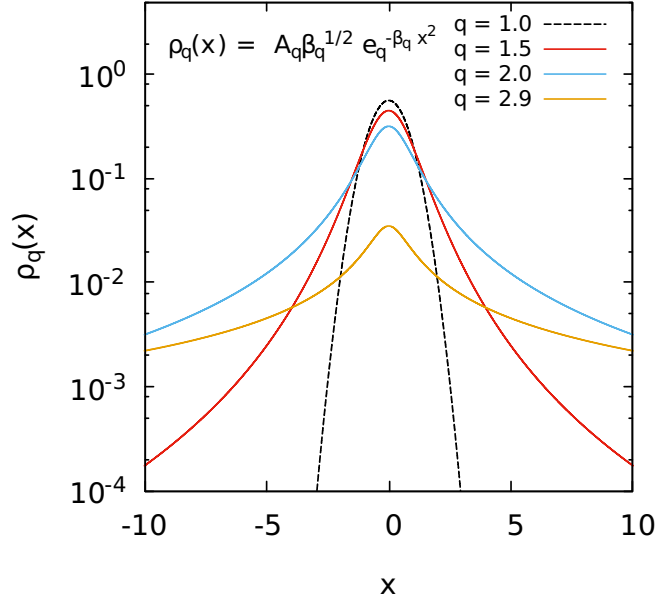


Figura 3.1: Distribuições q -Gaussianas para alguns valores de q . Nesta escala mono-log, uma Gaussiana se apresenta como uma parábola (linha pontilhada).

3.3 Escalonamento de Sistemas Não Extensivos

Considere um sistema Hamiltoniano,

$$H = \sum \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i \neq j} V(r_{i,j}), \quad (3.31)$$

que possua potencial atrativo entre pares de partículas, do tipo:

$$V(r) \propto -\frac{1}{r^\alpha}, \quad (3.32)$$

onde r é a distância entre o par de partículas e α o parâmetro que regula o alcance da interação. A energia potencial média por partícula pode ser determinada por meio da integral de volume (em um espaço d -dimensional):

$$\frac{V}{N} \propto \int_1^\infty r^{-\alpha} r^{d-1} dr = \frac{r^{d-\alpha}}{d-\alpha} \Big|_1^\infty = \begin{cases} < \infty & \text{se } \alpha > d & \text{(curto alcance),} \\ \rightarrow \infty & \text{se } 0 \leq \alpha \leq d & \text{(longo alcance).} \end{cases} \quad (3.33)$$

Esta integral possui dois comportamentos distintos a depender da razão entre α e d , em que d é dimensão espacial. Ela converge quando $\alpha > d$, mas diverge para a condição $0 \leq \alpha \leq d$. Para o primeiro caso, o potencial é denominado de curto alcance, e de longo alcance para o segundo. Assim, com $d = 3$, o potencial gravitacional que possui $\alpha = 2$ é caracterizado como de longo alcance, e o potencial de Lennard-Jones, $\alpha = 6$, de curto alcance.

Como pode-se observar por meio da equação 3.33, a energia é extensiva para curto alcance e não extensiva para longo alcance. A divergência da eq.3.33 pode ser contornada, como realizada em [24], se considerarmos que as N partículas estão distribuídas de forma homogênea,

de modo que o hiper-volume de dimensões L é proporcional ao número de partículas, $L^d \propto N$, logo o limite superior da eq.3.33 pode ser substituído por $L \propto N^{1/d}$, ficando:

$$\frac{V}{N} \propto \int_1^{N^{1/d}} r^{-\alpha} r^{d-1} dr = \frac{1}{d} N^*, \quad (3.34)$$

com

$$N^* \equiv \frac{N^{1-\alpha/d} - 1}{1 - \alpha/d} = \ln_{\alpha/d} N, \quad (3.35)$$

ou ainda melhor, como ficará mais claro adiante,

$$\tilde{N} \equiv N^* + 1. \quad (3.36)$$

No limite assintótico para N grande, temos:

$$\tilde{N} \approx \begin{cases} \frac{\alpha/d}{\alpha/d-1} & \text{se } \alpha/d > 1, \\ \ln N & \text{se } \alpha/d = 1, \\ \frac{N^{1-\alpha/d}}{1-\alpha/d} & \text{se } 0 \leq \alpha/d < 1. \end{cases} \quad (3.37)$$

O potencial do Hamiltoniano pode ser reescalado utilizando-se \tilde{N} , como segue:

$$\tilde{H} = \sum \frac{p_i}{2m} + \frac{1}{\tilde{N}} \sum_{i \neq j} V(r_{i,j}), \quad (3.38)$$

tornando-o extensivo. Este tipo de reescalonamento artificial vem sendo empregado a algum tempo na aproximação de campo médio, caso em que $\alpha = 0$. A substituição de N^* por \tilde{N} foi realizada tendo por objetivo recuperar o valor frequentemente utilizado na aproximação de campo médio, $\tilde{N} = N$, e satisfazer $\tilde{N} = 1$ para um sistema sem interação ($\alpha \rightarrow \infty$).

Na eq.3.38 a energia potencial foi reescalada, por meio do fator \tilde{N} , de modo a torná-la extensiva. Uma outra abordagem possível é trabalhar com novas variáveis termodinâmicas, como exposto em [40]. Considere a energia livre de Gibbs:

$$G = U - TS + pV, \quad (3.39)$$

onde U , S , p e V correspondem, respectivamente, a energia interna total, entropia, pressão e volume. Ao dividirmos a eq.3.39 por N , obtemos a energia livre de Gibbs por partícula:

$$\frac{G}{N} = \frac{U}{N} - T \frac{S}{N} + p \frac{V}{N}, \quad (3.40)$$

no limite de $N \rightarrow \infty$, para um sistema com interação de curto alcance ($\alpha/d \leq 1$), a razão das variáveis G , U , S e V por N dão um valor finito, o que as caracterizam como extensivas, de modo que podemos escrever:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{G}{N} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{U}{N} - \lim_{N \rightarrow \infty} T \frac{S}{N} + \lim_{N \rightarrow \infty} p \frac{V}{N}, \quad (3.41)$$

$$g = u - Ts + pv, \quad (3.42)$$

onde, $g \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} G/N$, e de forma análoga define-se u , s e v . As variáveis T e p são independentes de N , por este motivo são classificadas como intensivas. Quando o potencial é de longo alcance $0 \leq \alpha/d \leq 1$, ao tomar o limite $N \rightarrow \infty$, as variáveis G e U divergem, logo não

podemos escrever a equação 3.42. Tsallis [40] diz que para a equação ter sentido termodinâmico é necessário que ela gere valores finitos, para isto, ele propõem dividir a equação por \tilde{N} (eq.3.37), assim ao tomarmos o limite $N \rightarrow \infty$ obtém-se:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{G}{N\tilde{N}} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{U}{N\tilde{N}} - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{T}{\tilde{N}} \frac{S}{N} + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{p}{\tilde{N}} \frac{V}{N}, \quad (3.43)$$

$$\tilde{g} = \tilde{u} - \tilde{T}s + \tilde{p}v \quad (3.44)$$

Desta maneira, passam a existir três classes de variáveis termodinâmicas:

1. Pseudointensiva (T e p) que escalam com \tilde{N} ;
2. Pseudoextensiva, que representam energias (G e U), elas escalam com $N\tilde{N}$;
3. E as que permanecem extensivas, S e V , que escalam com N .

A equação 3.44 recupera o caso usual, eq.3.42, se $\alpha/d > 1$, como ilustra a fig.3.2.

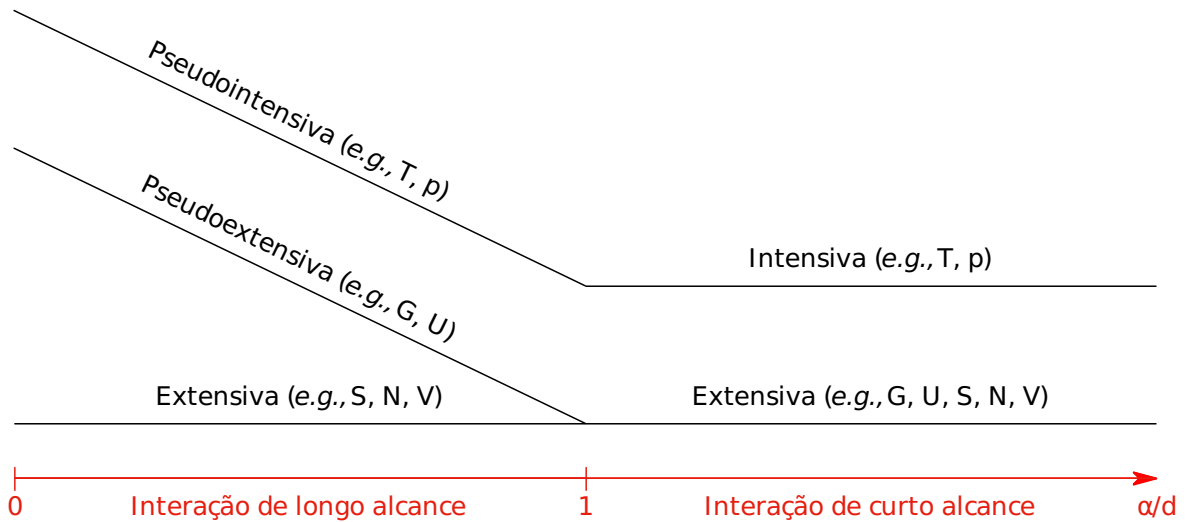


Figura 3.2: Na região de interação de longo alcance ($0 \leq \alpha/d \leq 1$) existe três classes de variáveis termodinâmicas: as que escalam com \tilde{N} nomeadas de pseudointensivas; aquelas que escalam com $N\tilde{N}$ denominadas pseudoextensivas; e as extensivas que escalam com N . Para interações de curto alcance ($\alpha/d > 1$) recupera-se as duas classes usuais que aparecem nos livros de termodinâmica. As variáveis pseudointensivas se tornam intensivas (independentes de N), e as pseudoextensivas se unem com as extensivas, gerando um único ramo extensivo. (Figura adaptada de [40])

3.4 Conjectura do equilíbrio termodinâmico de Tsallis

Termodinâmica diz a respeito de sistemas macroscópicos, isto é, sistemas formados por um grande número de partículas, a palavra grande, neste contexto, implica no limite: $N \rightarrow \infty$. Um sistema é dito estar em **equilíbrio**, quando se aproxima assintoticamente de um comportamento estável estacionário, ao se tomar o limite temporal: $t \rightarrow \infty$. Logo, para estar no estado

de **equilíbrio termodinâmico** é necessário, mas não suficiente, tomar os limites: $N \rightarrow \infty$ e $t \rightarrow \infty$. Mas qual limite tomar primeiro? Tsallis levantou em [43] a conjectura da não comutatividade destes limites, para um sistema de longo alcance. Considere um sistema inicialmente fora de equilíbrio com N partículas com potencial de interação do tipo $1/r^\alpha$. No caso de curto alcance ($\alpha/d > 1$), após um transiente, o sistema atinge o estado de equilíbrio (fig.3.3(a)). Neste caso os limites temporal e termodinâmico comutam,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} f(t, N) = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} f(t, N), \quad (3.45)$$

e a mecânica estatística usual ($q=1$) é válida. A conjectura proposta por Tsallis para o equilíbrio

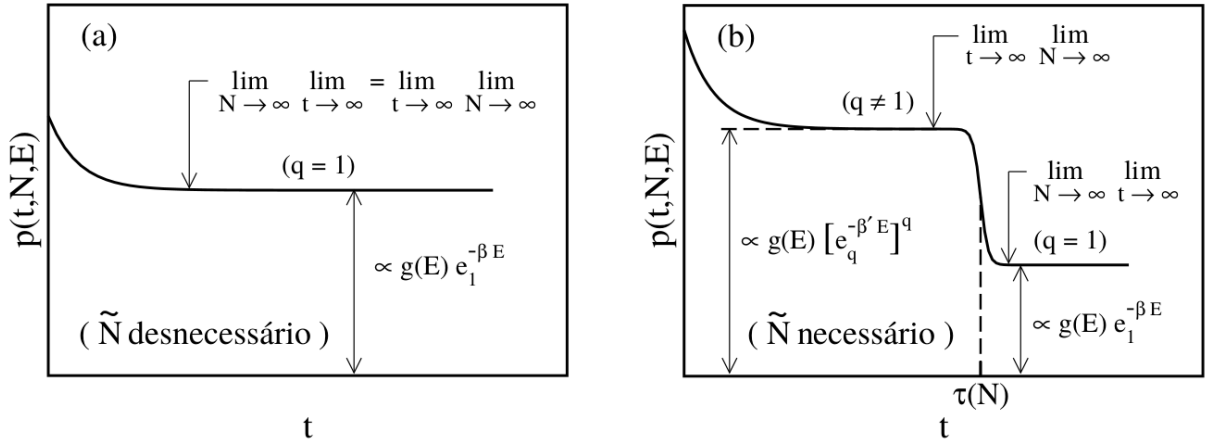


Figura 3.3: Conjectura de Tsallis para o equilíbrio termodinâmico. Fonte: Borges [7]

termodinâmico diz que em um sistema com interação de longo alcance, $0 \leq \alpha/d \leq 1$, a ordem no qual os limites são tomados passa a ser importante, devido as convergências não uniformes. A fig.3.3(b) ilustra a conjectura. Para um sistema de longo alcance, dependendo da condição inicial, o sistema pode tender a um estado estacionário, representado pelo primeiro patamar da figura 3.3(b). Neste patamar a distribuição de energias não é dada pelo fator de Boltzmann, mas sim por uma q -exponencial,

$$p(E) \propto g(E) [1 - (1 - q)\beta' E]^{1/q} \quad (3.46)$$

$$p(E) \propto g(E) [e_q(-\beta' E)]^q. \quad (3.47)$$

Após permanecer um tempo neste estado (da ordem de $\tau(N)$), o sistema espontaneamente inicia uma transição para outro estado, segundo patamar da fig.3.3(b), cuja distribuição de energias é dada pelo fator de Boltzmann ($q = 1$). O tempo de transição deve divergir com N (para $0 \leq \alpha/d \leq 1$),

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \tau(N) \rightarrow \infty. \quad (3.48)$$

Isso implica que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} f(t, N) \neq \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} f(t, N). \quad (3.49)$$

Se o limite termodinâmico for tomado antes do limite temporal, ($\lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty}$), (condição necessária, mas não suficiente) o sistema permanece indefinidamente no primeiro patamar, o que permite classificá-lo como um estado de equilíbrio (muitas vezes denominado equilíbrio meta-estável).

Esta conjectura foi verificada parcialmente. A existência de dois patamares, e o aumento do tempo de transição em função de N (segundo uma lei de potência, ao menos no caso de rotores) para o caso de interações de longo alcance foram observados. Assim também, a temperatura do segundo patamar é aquela compatível com BG. (veja, por exemplo [40] e referências lá contidas). Mas o quadro se mostrou mais elaborado do que a conjectura original. Para sistemas com curto alcance, tudo ocorre como esperado, obedecendo a distribuição de BG. Trabalhos de Cirto e outros [12] mostraram, no caso de rotores com interações de longo alcance, que são observadas distribuições q -Gaussianas no segundo patamar, apesar da temperatura ser aquela de BG. Novos questionamentos são, então colocados. É possível que o sistema alcance a distribuição de equilíbrio, aquela de BG, lentamente, isto é, inicialmente o primeiro momento atinge BG (a temperatura), e progressivamente os momentos superiores, até que toda a distribuição seja BG. Mas não há evidências que comprovem isso. Até onde as simulações foram feitas, as distribuições aparentam ser estáveis. Não se sabe se, em tempos muito longos, não alcançados nas simulações já feitas, essas distribuições q -Gaussianas se transformem em Gaussianas. Mas é também possível que essas distribuições q -Gaussianas sejam estáveis, e o sistema permaneça indefinidamente em um estado de equilíbrio meta-estável.

Capítulo 4

Potencial de Hénon-Heiles

Este capítulo é dedicado ao sistema de Hénon-Heiles e às distribuições da seção de Poincaré do mesmo. As seções iniciais são basicamente reprodução e discussão do artigo [21]. Na primeira seção será apresentado o potencial do sistema juntamente com a análise dos pontos de equilíbrio. Em seguida será comparado e estabelecido o método e tamanho do passo de integração que será adotado nos procedimentos numéricos deste capítulo. Nesta seção ainda será analisada algumas órbitas no espaço de fase e a caracterização das mesmas por meio do expoente de Lyapunov. Em (4.3) será mostrado como reduzir o estudo do fluxo 4- D a um mapa de Poincaré 2- D . A seção 4.4 trata dos métodos numéricos utilizados para o cálculo do expoente de Lyapunov (λ) e da seção de Poincaré. Por último, é analisada a distribuição dos momentos.

4.1 O Potencial de Hénon-Heiles

No início da década de sessenta, vários astrônomos estavam interessados na questão da existência da terceira integral de movimento da galáxia (as duas primeiras são a conservação da energia total e do momento linear total). Basicamente eles supunham um potencial galáctico independente do tempo e com simetria axial. A pergunta era: ao seguir uma estrela por um longo tempo (muitas revoluções), submetida a tal potencial, qual seria o espaço preenchido por tal trajetória?

Em 1964 os astrônomos Michel Hénon e Carl Heiles se dedicaram a este problema através de uma abordagem computacional. No entanto, como dito por eles:

"but, in order to have more freedom of experimentation, we forget momentarily the astronomical origin of the problem and consider it in its general form: does an axisymmetrical potential admit a third isolating integral of motion? Thus, we allow the potential U_g to be an arbitrary function of R and z , not necessarily representing an actual galactic potential."

Com esta liberdade de escolha eles chegaram ao seguinte potencial

$$V(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + x^2y - \frac{1}{3}y^3, \quad (4.1)$$

justificando-o com os seguintes argumentos: (1) é analiticamente simples; isto torna fácil a computação da trajetória; (2) e ao mesmo tempo é suficientemente complicado para dar trajetórias que estão longe de serem triviais.

Este potencial tornou-se um paradigma para sistemas Hamiltonianos não-lineares. A sua riqueza de comportamento gera muitos artigos ainda hoje, mais de meio século da publicação original. Grande parte destes artigos são dedicados à classificação das órbitas, caóticas ou regulares (para energias inferiores à energia de escape), ou a propriedades de escape (para energias superiores) [2]. O presente trabalho encontra-se na categoria de classificação.

Os pontos de equilíbrio da eq. 4.1 são obtidos através da condição

$$\nabla V(x, y) = \vec{0}, \quad (4.2)$$

onde ∇ é o operador gradiente, definido por $\nabla \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)\hat{i} + \left(\frac{\partial}{\partial y}\right)\hat{j}$, logo

$$\nabla V(x, y) = (x + 2xy)\hat{i} + (y + x^2 - y^2)\hat{j}, \quad (4.3)$$

com a condição 4.2, obtém-se:

$$(x + 2xy)\hat{i} + (y + x^2 - y^2)\hat{j} = (0)\hat{i} + (0)\hat{j}. \quad (4.4)$$

Logo, os pontos de equilíbrio são: $P_1 = (0, 1)$, $P_2 = \left(\sqrt{\frac{3}{4}}, -\frac{1}{2}\right)$, $P_3 = \left(-\sqrt{\frac{3}{4}}, -\frac{1}{2}\right)$ e $P_4 = (0, 0)$.

Por meio do determinante da matriz Hessiana

$$\det \mathbf{H} = \begin{vmatrix} 1 + 2y & 2x \\ 2x & 1 - 2y \end{vmatrix} = -4(x^2 + y^2) + 1,$$

classificam-se os pontos P_1 , P_2 e P_3 como pontos de sela, enquanto P_4 é um ponto de mínimo local. Os três pontos de sela estão separados por um ângulo de $2\pi/3$, e suas energias são idênticas, $E_1 = E_2 = E_3 = 1/6$. Observe na fig. (4.1) que estes três pontos correspondem a energia de escape, isto é, a energia mínima necessária para sair do poço de potencial. Nesta dissertação utilizou-se somente energias menores que o valor de escape.

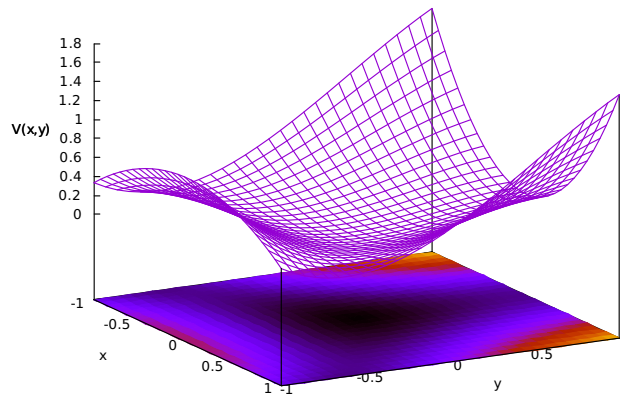


Figura 4.1: Potencial de Hénon-Heiles (eq. (4.1)).

4.2 Dinâmica das órbitas

O sistema dinâmico de Hénon-Heiles (HH) é descrito pelo Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) + V(x, y), \quad (4.5)$$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + x^2y - \frac{1}{3}y^3, \quad (4.6)$$

onde p_x e p_y representam os momentos das coordenadas x e y , e $V(x, y)$ é o potencial de HH (4.1). Portanto, as equações canônicas de movimento são:

$$\dot{x} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_x} = p_x, \quad (4.7)$$

$$\dot{y} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_y} = p_y, \quad (4.8)$$

$$\dot{p}_x = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} = -x - 2xy, \quad (4.9)$$

$$\dot{p}_y = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial y} = -y - x^2 + y^2. \quad (4.10)$$

Ao integrar numericamente as equações canônicas de movimento, o integrador simplético de Yoshida mostrou-se mais apropriado que o RK4, como pode ser observado na fig. 4.2. No gráfico da direita da fig. 4.2, é estudado o comportamento da variação média da energia em função do tamanho do passo. A partir da análise destes gráficos, chegamos ao entendimento que o integrador de Yoshida com passo $\tau = 0,01$ é satisfatório para os devidos fins desta dissertação, e assim, o adotamos.

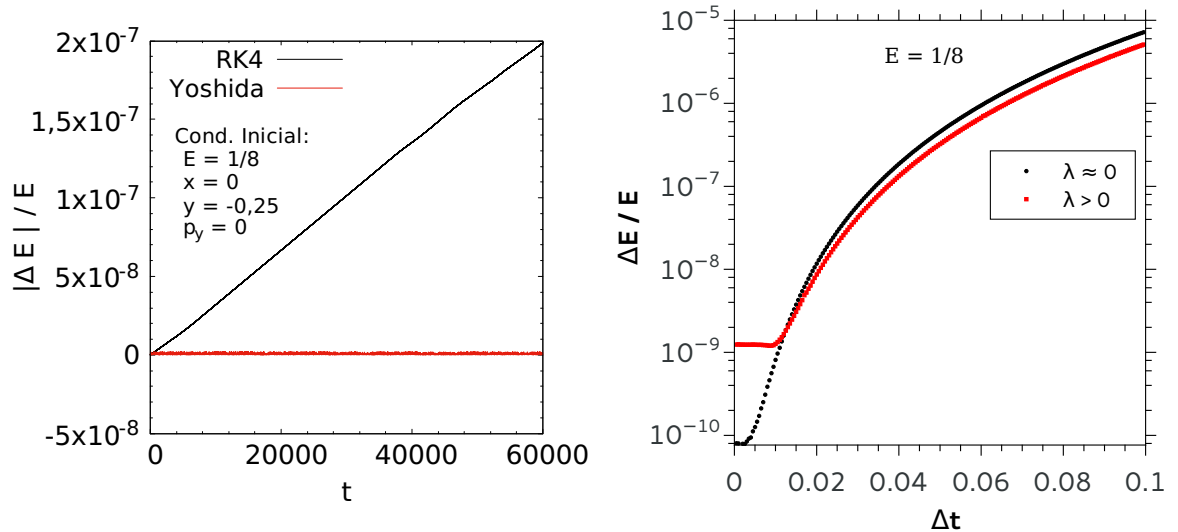


Figura 4.2: Erro relativo na energia total na integração numérica do sistema HH. (a) Comparação entre a evolução temporal dos erros relativos para os integradores Runge-Kutta de quarta ordem (curva preta) e Yoshida (curva vermelha). Condição inicial: $E = 1/8$, $x = 0$, $y = -0,25$, $p_y = 0$. (b) Erro relativo em função do passo de integração, para o integrador Yoshida. Curva preta: $\lambda \approx 0$; curva vermelha: $\lambda > 0$. Condição inicial: ...

No sistema de Hénon-Heiles há a possibilidade de coexistirem órbitas quase-periódicas e caóticas para um mesmo valor de energia. Para ilustrar este fato, tomamos a energia $E = 1/8$ com duas condições iniciais, $(x = 0, y = 0,1, p_y = 0)$ e $(x = 0, y = -0,25, p_y = 0)$, e evoluímos suas trajetórias por um tempo $t = 500$. O resultado deste procedimento é exibido na fig. 4.3. Como pode-se ver nos gráficos da esquerda, que correspondem à condição inicial $(x = 0, y = 0,1, p_y = 0)$, a órbita tem um padrão bem definido e restrito a uma determinada região; esta órbita é dita quase-periódicas. Para a outra condição inicial, ilustrada à direita, é possível visualizar-se um comportamento mais disperso; este movimento é caótico.

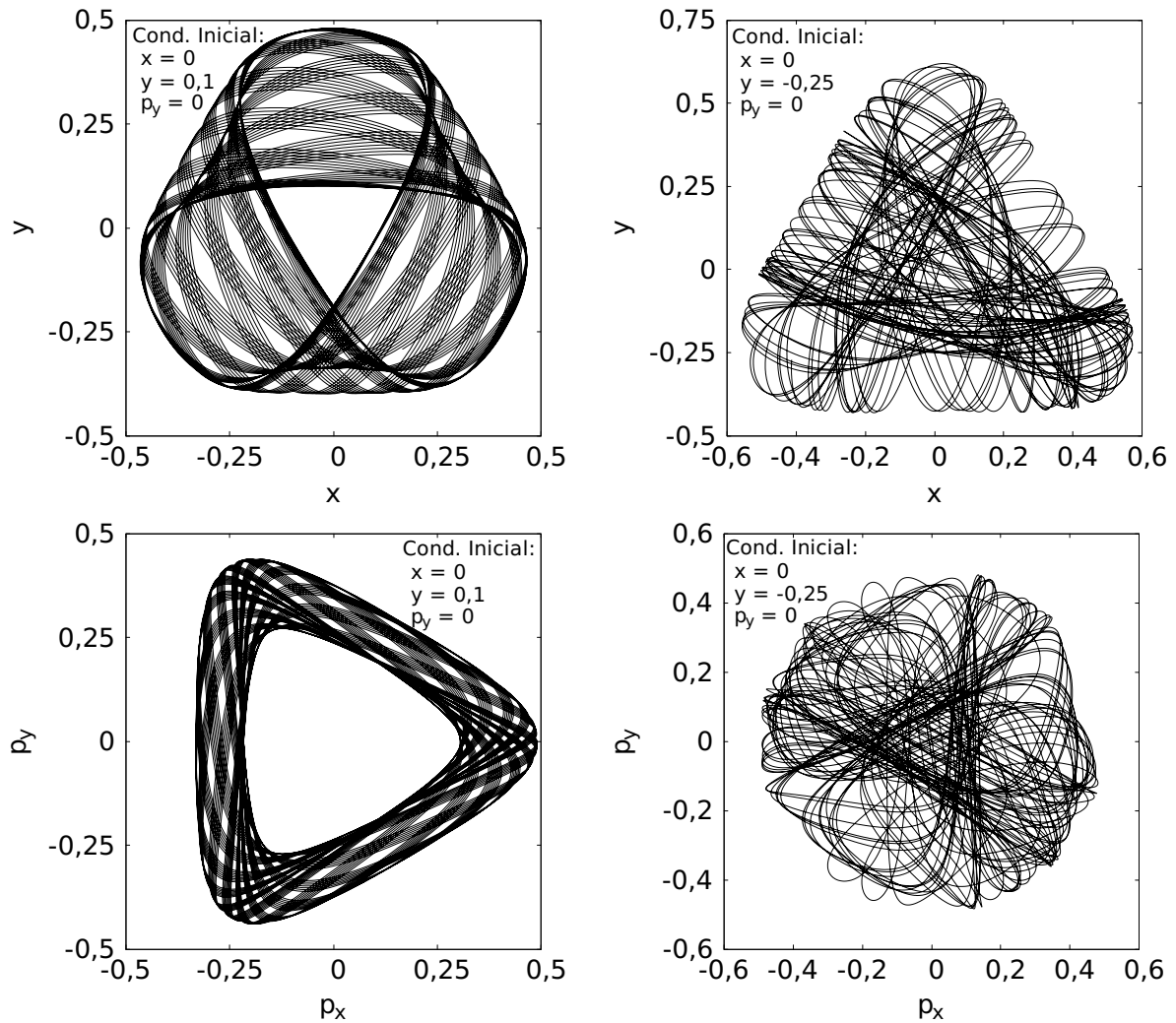


Figura 4.3: Trajetórias com $E = 1/8$, para as condições iniciais: $x = 0, y = 0,1, p_y = 0$ (figuras da esquerda) e $x = 0, y = -0,25, p_y = 0$ (figuras da direita). Integração realizadas até $t = 500$. Linha superior: espaço das posições $(x-y)$ Linha inferior: espaço dos momentos (p_x-p_y) .

A caracterização quantitativa da dinâmica das órbitas, quanto à sua caoticidade, pode ser realizada por meio de métodos que medem a taxa de divergência entre órbitas inicialmente próximas, como o expoente de Lyapunov e o SALI (Smaller Alignment Index). As figuras 4.4 e 4.5 mostram, respectivamente, a evolução temporal do expoente de Lyapunov e do indicador SALI para as órbitas citadas no parágrafo anterior. O comportamento do indicador SALI é oposto ao do expoente de Lyapunov: órbitas quase-periódicas são identificadas por expoentes de Lyapunov nulos, e valores positivos do SALI. Órbitas caóticas são identificadas por expoentes de Lyapunov positivos, e valores nulos do SALI. Um valor rigorosamente nulo não

é obtido em um tratamento computacional. Os indicadores avaliados se aproximam de zero, e é isso que as figuras indicam.

Na fig. 4.4 (a) o expoente de Lyapunov tende a zero, o que implica um comportamento quase-periódico. Na fig. 4.4 (b) o expoente de Lyapunov se estabiliza em torno de $t = 10^4$ para o caso $\lambda > 0$, logo esta órbita é caótica.

Correspondentemente, o indicador SALI oscila em torno de 10^0 (curva preta) no caso quase-periódico, e tende rapidamente para zero (curva vermelha em fig. 4.5 (a)), no caso caótico. Na figura 4.5 (b) está representado o SALI apenas para a órbita caótica, em escala monologaritmica, indicando que este indicador tende exponencialmente a zero para o caso caótico, e é esse o significado da palavra “rapidamente” utilizada anteriormente. O ajuste linear (linha roxa) da curva é obtido por meio do método dos mínimos quadrados. A curva verde exibe o decaimento de acordo com o valor estabilizado do expoente de Lyapunov da figura 4.4 (a), onde se percebe que ambas as curvas têm a mesma inclinação (dentro da faixa de erros aceitável para esse problema). Verificando-se assim a relação: $SALI \approx ce^{\lambda t}$.¹ Ambos os indicadores SALI e expoente de Lyapunov levam às mesmas conclusões. A diferença entre eles é que o SALI chega a um resultado mais rapidamente que o Lyapunov. No exemplo que consideramos, a ordem de grandeza para caracterizarmos com o SALI é de $\mathcal{O}t = 10^2$, enquanto o expoente de Lyapunov se estabiliza em $\mathcal{O}t = 10^4$.

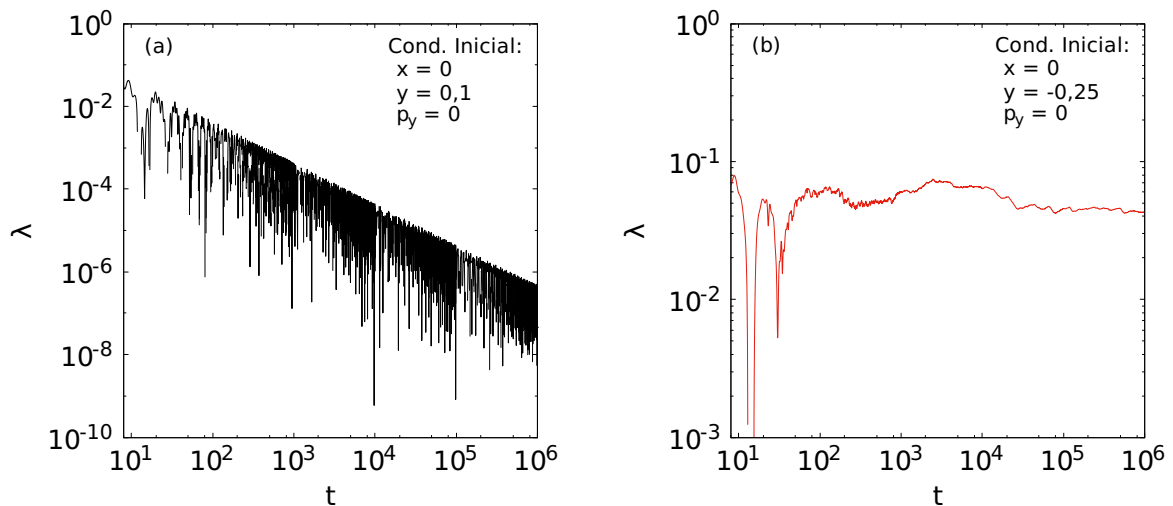


Figura 4.4: Evolução temporal do expoente de Lyapunov para as mesmas condições iniciais utilizadas na figura 4.3, energia $E = 1/8$: (a) caso quase-periódico ($x = 0$, $y = 0,1$, $p_y = 0$); (b) caso caótico ($x = 0$, $y = -0,25$, $p_y = 0$);

¹ Os resultados para o SALI aqui apresentados são reprodução dos obtidos na referência [36].

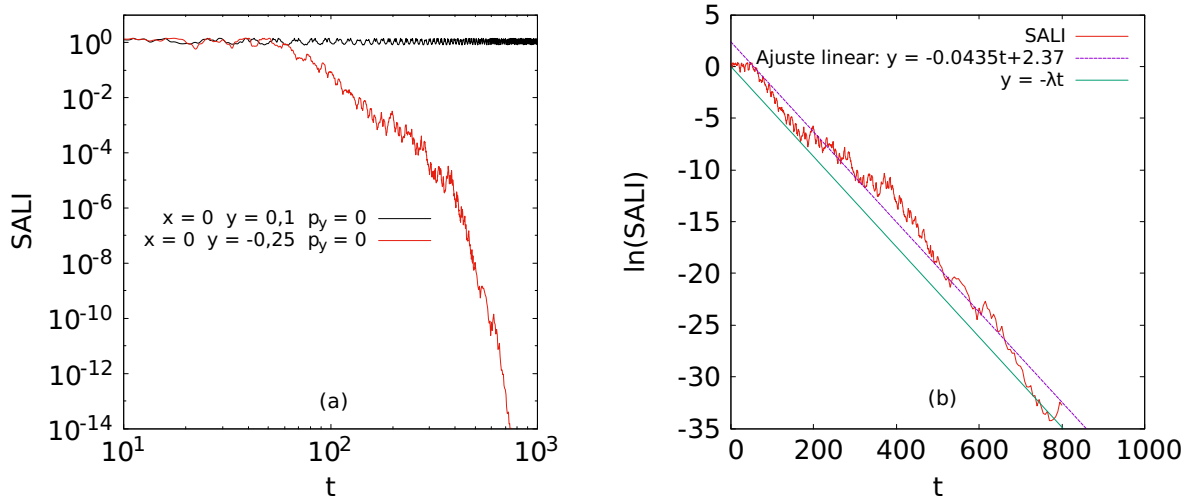


Figura 4.5: (a) Evolução temporal do SALI, para as condições iniciais com energia $E = 1/8$: $(x = 0, y = 0,1, p_y = 0)$; $(x = 0, y = -0,25, p_y = 0)$; em preto e vermelho respectivamente. (b) órbita de condição inicial $(x = 0, y = -0,25, p_y = 0)$. Ajuste linear (linha roxa). Decaimento exponencial $y = \ln(e^{\lambda t})$ (linha verde), onde λ é o expoente de Lyapunov com valor: $\lambda = 0,04359$ o mesmo que consta na figura 4.4.

4.3 Secção de Poincaré

Além da sensibilidade às condições iniciais, os sistemas caóticos possuem como característica o comportamento irregular das trajetórias. A regularidade da trajetória pode ser investigada, de forma qualitativa, por meio da aparência dos pontos de intersecção da trajetória com uma superfície Ω , em outras palavras, com a secção de Poincaré. A secção de Poincaré se mostra útil quando há possibilidade de reduzir o número de dimensões do sistema estudado para duas (ou uma) no espaço de fase, pois desta maneira fica facilitado tirar-se conclusões sobre a regularidade das trajetórias por meio de inspeção visual. O sistema de Hénon-Heiles é um destes sistemas no qual é viável reduzir a análise a duas dimensões, como mostraremos a seguir.

O Hamiltoniano (4.6) é independente do tempo, logo \mathcal{H} é uma constante de movimento, cujo valor corresponde a energia total, $\mathcal{H} = E$. Portanto, para uma dada superfície de energia E , o sistema de Hénon-Heiles possui três graus de liberdade, de tal forma que o momento p_x , por exemplo, passa a ser determinado em função das variáveis $\{x, y, p_y\}$ e da constante E :

$$p_x = \left(2E - p_y^2 - (x^2 + y^2) - 2x^2y + \frac{2}{3}y^3 \right)^{1/2}. \quad (4.11)$$

Ao tomar os pontos de intersecção do fluxo com a secção de Poincaré Ω , localizada em $x = 0$, consegue-se, junto com a restrição da energia E , eliminar x e p_x , reduzindo o estudo de um fluxo 4-dimensional a um mapa bidimensional (y, p_y) .

Os valores de p_x sobre $\Omega : x = 0$, de acordo com a equação (4.11), são:

$$p_x = \left(2E - p_y^2 - y^2 + \frac{2}{3}y^3 \right)^{1/2}. \quad (4.12)$$

Como $p_x^2 \geq 0$, temos então, que o mapa de Poincaré está restrito a região que satisfaz:

$$\frac{1}{2}(p_y^2 + y^2) - \frac{1}{3}y^3 \leq E. \quad (4.13)$$

Na figura 4.6 estão representados os mapas de Poincaré, tomando-se a intersecção com Ω no sentido $p_x > 0$, para diversos valores de energia. Para baixas energias há predominância de regiões quase-periódicas (curvas fechadas). A proporção da região caótica (pontos dispersos), em relação ao espaço de fase acessível ao sistema, cresce com o aumento da energia, até atingir o máximo com $E = 1/6$. Note que para esta energia, que corresponde a energia de escape, ainda existem regiões com órbitas quase-periódicas, portanto não existe um valor para E o qual todas as trajetórias sejam caóticas.

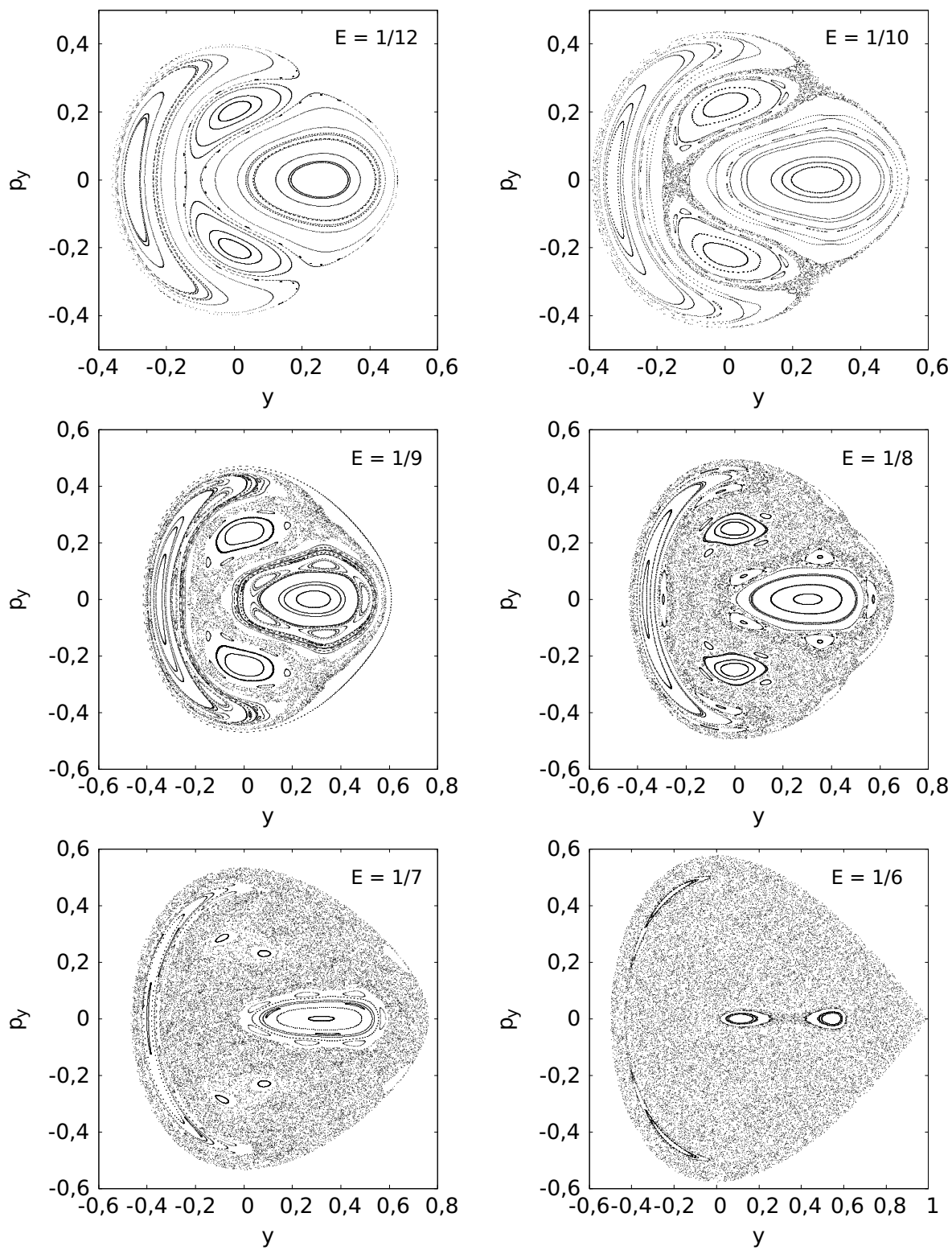


Figura 4.6: Secção de Poincaré para diversas energias. A proporção da área ocupada por órbitas caóticas diminui com o aumento da energia.

4.4 Procedimentos Numéricos

Seguindo a linha do artigo [39], resolvemos verificar se o sistema HH possui o mesmo tipo de comportamento encontrado no Mapa Padrão, isto é, será que o o espaço de fases completamente caótico apresenta distribuições gaussianas, e o espaço de fases completamente quase-periódico, não? Não sendo gaussianas, seriam q -gaussianas? Em sendo q -gaussianas, teriam elas o mesmo valor de q para diferentes energias? E quando o espaço de fases apresenta regiões caóticas e quase-periódicas, será que as distribuições são uma composição linear de uma gaussiana com uma q -gaussiana? Para tentar responder a estas perguntas, vamos realizar os mesmos procedimentos utilizados em [30, 31, 39].

Nos artigos [30, 31, 39] foram analisadas as distribuições da variável:

$$\delta_{\xi}^j \equiv \sum_{i=1}^N (\xi^{i,j} - \langle \xi \rangle), \quad (4.14)$$

para os mapas padrão (*standard map*) e *web* (mapa em teia, em uma tradução livre). A média $\langle \xi \rangle$ é realizada sobre o número N de iterações e também em relação ao número de condições iniciais M , i.e.,

$$\langle \xi \rangle = \frac{1}{M} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N \xi^{i,j}. \quad (4.15)$$

Atente-se que as letras i e j , que aparecem nas eq. 4.14 e 4.15, sobre a variável ξ do sistema estudado, são apenas índices, e não expoentes.

A variável δ_{ξ}^j é definida para sistemas discretos, como mapas. Para utilizá-la no sistema de Hénon-Heiles, que é contínuo, é preciso discretizar HH através da secção de Poincaré.

Os conceitos de tempo convencional (*clock time*) tempo natural (*natural time*), também denominado *interoccurrence time* (livremente traduzido por tempo de inter-ocorrência), são utilizados em alguns trabalhos dedicados à análise de séries temporais, por exemplo, de terremotos e eletrocardiogramas [1, 33, 46] e foram introduzidos por [45, 47]. O tempo convencional é o que aparece nas equações do movimento, por exemplo, eq. (1.2), portanto contínuo. Na avaliação numérica, que obviamente é sempre discreta, o tempo convencional é aproximado pelo tempo de integração, tanto melhor quanto menor for o passo de integração. O tempo natural, já adaptado ao presente caso, é dado pela contagem discreta de cruzamentos da órbita com a secção de Poincaré.

A adaptação da eq. (4.15) pode ser feita reescrevendo-a na forma:

$$\langle \xi \rangle = \frac{1}{\sum_k^M T_k} \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^{T_j} \xi^{i,j} \quad (4.16)$$

onde T_j representa o tempo natural para a evolução temporal da condição inicial j , ou seja, o número de intersecções com a superfície Ω . No caso de todas as condições iniciais serem evoluídas até o mesmo tempo convencional final t_F , o tempo natural T_j difere para cada condição inicial. Alternativamente, podemos fixar o tempo natural final T_j para todas as realizações ($T_j \equiv N, \forall j$). Procedendo dessa forma, pode-se utilizar diretamente a eq. (4.15).

A variável que investigamos em HH é o momento p_y , de forma que as equações 4.14 e 4.15 ficam:

$$\delta_{p_y}^j \equiv \sum_{i=1}^N (p_y^{i,j} - \langle p_y \rangle), \quad (4.17)$$

$$\langle p_y \rangle = \frac{1}{M} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N p_y^{i,j}. \quad (4.18)$$

Para gerar as M condições iniciais, contidas na superfície $\Omega : x = 0$, utilizadas no estudo, seguimos os passos abaixo:

1. sorteia-se um valor aleatório para y e outro para p_y ;
2. verifica-se se estes valores satisfazem a condição 4.13;
3. caso a condição 4.13 seja satisfeita, calcula-se o valor de p_x por meio da relação 4.12 e armazena-se a condição inicial (y, p_y, p_x) em um arquivo;
4. repete-se estes passos até que se tenha M condições iniciais.

Após gerada as condições iniciais, são realizados os procedimentos de evolução da órbita, cálculo de λ_j e de $\delta_{p_y}^j$. No apêndice A encontra-se o fluxograma do algoritmo utilizado para realizar estes cálculos.

Procedimentos:

1. Leitura dos dados de entrada, energia (E), número de condições iniciais (M), número de intersecções (N) da órbita com Ω . As etapas abaixo deverão ser executadas para cada uma das M condições iniciais.
2. Leitura das condições iniciais $(y^{0,j}, p_y^{0,j}, p_x^{0,j})$.
3. Evolução da órbita fiducial e da perturbada, através da integração das equações canônicas de movimento 4.10.
4. Cálculo do expoente de Lyapunov (λ_j).
5. Renormalização das órbitas;
6. Verificação se houve cruzamento da secção de Poincaré Ω . Este exame é feito por meio da análise do sinal do produto da variável $x(t)$ por seu valor no passo anterior $x(t-1)$, ao cruzar a superfície $\Omega : x = 0$ ocorre mudança de sinal, logo $x_t x_{t-1} \leq 0$.
7. Caso tenha cruzado Ω , aplica-se a técnica desenvolvida por Hénon [20], descrita na seção 2.1, isto é, de acordo com a eq. 2.5, altera-se a variável de integração t por x e realiza-se um passo de integração de tamanho $\Delta x = -x(t)$, com o intuito de obter o ponto da órbita sobre a superfície Ω . Por fim, acumula-se o momento p_y calculado ($\sum p_y$), e retorna a utilizar t como variável de integração.
8. Estes passos são repetidos a partir da etapa 2 até que a órbita cruze a secção de Poincaré N vezes.
9. No final são gravados os dados $(y^{0,j}, p_y^{0,j}, \sum_{i=1}^N p_y^{i,j}, \lambda_j)$.

No passo 9 armazenamos o valor do somatório de p_y de cada uma das condições iniciais. De posse destes somatórios é simples calcular a média $\langle p_y \rangle$ (eq. 4.18). Pode parecer, a primeira vista, que devíamos ter armazenado o valor de cada $p_y^{i,j}$ também, para que pudéssemos calcular o desvio da média $(p_y^{i,j} - \langle p_y \rangle)$ e por fim $\delta_{p_y}^j$, mas isto seria inviável em razão da grande

quantidade de dados que teríamos de armazenar. Outra solução seria integrar as equações de movimento novamente, agora de posse da média $\langle p_y \rangle$ teríamos como calcular o somatório do desvio $\sum_{i=1}^N (p_y^{i,j} - \langle p_y \rangle)$ para cada condição inicial, contudo este procedimento dobraria o tempo computacional. Uma solução mais simples para esse problema é obtida reescrevendo a eq. 4.17 na forma:

$$\delta_{p_y}^j = \sum_{i=1}^N p_y^{i,j} - \sum_{i=1}^N \langle p_y \rangle, \quad (4.19)$$

de modo que

$$\delta_{p_y}^j = \sum_{i=1}^N p_y^{i,j} - N \langle p_y \rangle, \quad (4.20)$$

$$\delta_{p_y}^j = \sum_{i=1}^N p_y^{i,j} - N \left(\frac{1}{M} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N p_y^{i,j} \right), \quad (4.21)$$

$$\delta_{p_y}^j = \sum_{i=1}^N p_y^{i,j} - \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N p_y^{i,j}. \quad (4.22)$$

Portanto, não precisamos conhecer o valor de cada p_y^i , a única informação que carecemos para o cálculo de $\delta_{p_y}^j$ é a do somatório $(\sum_{i=1}^N p_y^{i,j})$.

4.5 Resultados

Calculamos o valor do expoente de Lyapunov e do SALI para diferentes condições iniciais tomadas sobre a superfície Ω . O resultado deste cálculo, para $E = 1/8$, é apresentado na fig. 4.7 como mapa de cores. As escalas de cores de ambas as figuras 4.7 (a) e (b) foram ajustadas para representar órbitas quase-periódicas por preto e órbitas caóticas por amarelo. A inspeção visual indica que ambos os métodos (Lyapunov e SALI) levam a resultados qualitativamente semelhantes, discernindo adequadamente as órbitas quase-periódicas das caóticas. Ao comparar a figura 4.8, que apresenta mapas de cores dos expoentes de Lyapunov para diversas energias, com a figura obtida para as secções de Poincaré (fig. 4.6), nas mesmas energias, vemos que os dois métodos levam a conclusões semelhantes a respeito do comportamento das órbitas. Cada um dos métodos de classificação de órbitas, entretanto, apresenta suas conveniências. O método de Poincaré possui a vantagem de precisar de poucos pontos para classificar toda uma região. No sistema de Hénon-Heiles, por exemplo, uma única condição inicial é suficiente para identificar toda a região caótica, pois vai preenche-la completamente quando o tempo tende a infinito. Basta um ponto porque toda a região de caos no sistema de Hénon-Heiles é conexa. Sistemas que possuam regiões de caos desconexas necessitam de mais pontos: um ponto por região não conexa. O método do expoente de Lyapunov (assim também para o SALI) possui a conveniência de ser quantitativo. Ao tomar várias condições iniciais, fica fácil classificar diferentes órbitas de acordo com a faixa de λ (ou SALI) desejada. Doravante vamos utilizar o método dos expoentes de Lyapunov, por ser quantitativo e por ser mais costumeiro que o SALI na literatura correlata.

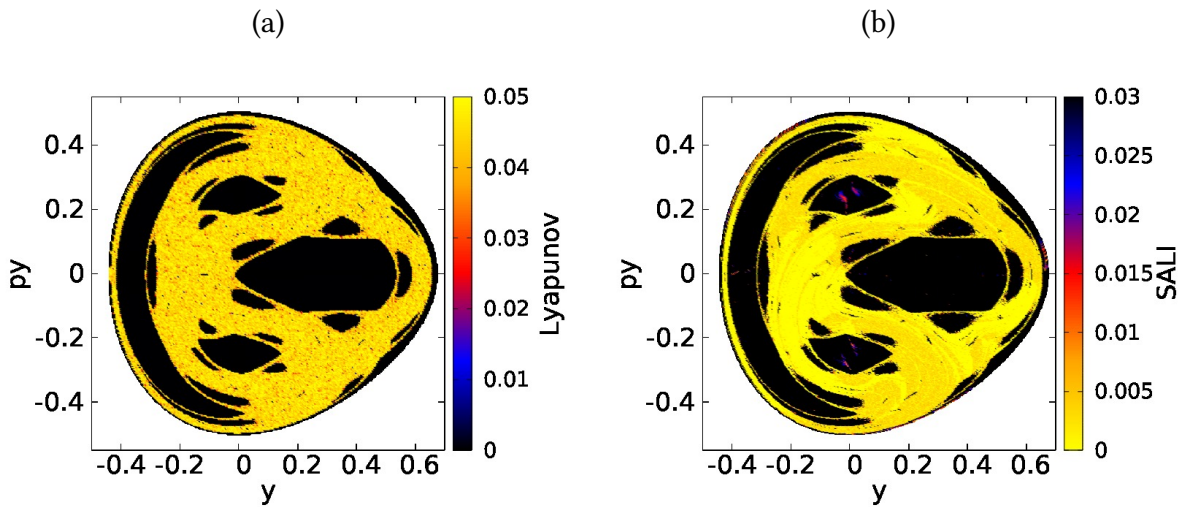


Figura 4.7: Mapa de cores com $E = 1/8$ para (a) expoente de Lyapunov; (b) SALI. Escala de cores crescente do preto para o amarelo na figura (a), e decrescente na figura (b).

Na figura (4.8) exibimos o mapa de cores do expoente de Lyapunov para diversas energias. Pode-se observar, nas escalas de cor dos mapas, que quanto mais alta a energia maior é o limite superior de λ , e que existe uma distinção clara entre regiões de caos, cores vermelha e amarela, e de órbitas quase-periódicas, pontos na cor preta. Na figura 4.9 apontamos que é possível se estabelecer pontos de corte para distinguir estas regiões de caos e quase-periodicidade. A fig. 4.9 mostra a razão entre o número de órbitas que possuem expoente de Lyapunov maior que o λ_{corte} , $N(\lambda > \lambda_{\text{corte}})$, e o número total de condições iniciais, N_{total} , em função do λ_{corte} adotado. O aumento do expoente de corte leva a duas quedas abruptas: a primeira ocorre quando $\lambda_{\text{corte}} \rightarrow 0$, para qualquer que seja a energia; a segunda queda depende da energia,

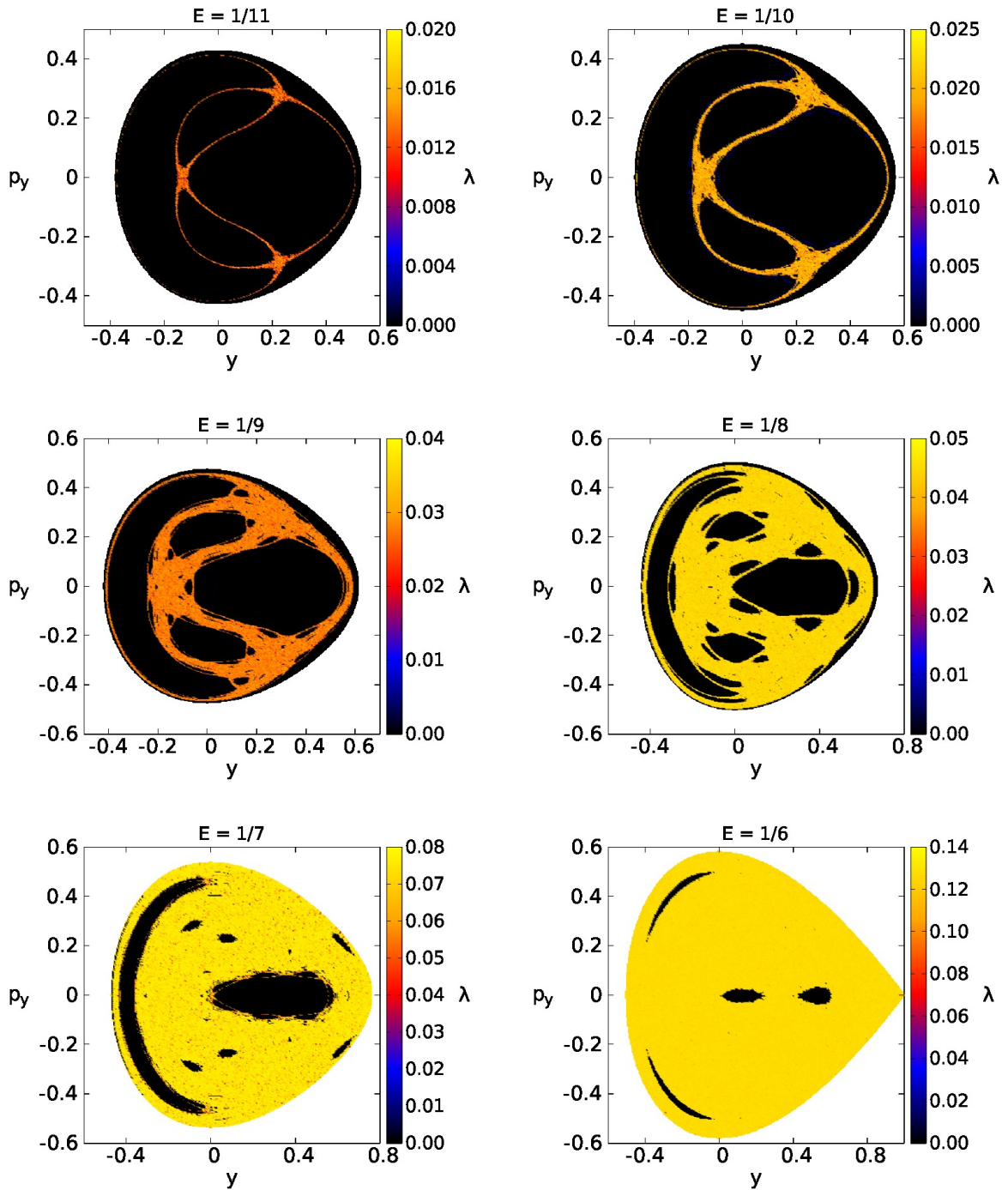


Figura 4.8: Mapa de cores para expoente de Lyapunov para diversos valores de energia. Regiões na cor preta correspondem a condições iniciais que levam à órbitas quase-periódicas, e as cores laranja e amarelo indicam movimento caótico.

quanto mais baixa a energia menor é a distância entre os pontos de queda. Denominaremos o λ_{corte} da primeira e da segunda queda de λ_- e λ_+ , respectivamente. Entre estes dois pontos, λ_- e λ_+ , a razão $N(\lambda > \lambda_{\text{corte}})/N_{\text{total}}$, permanece quase constante. Isto implica que existe predominância de apenas dois comportamentos: o comportamento quase-periódico, para $\lambda < \lambda_-$; e o comportamento caótico, para $\lambda > \lambda_+$. Entretanto não é possível estabelecer um critério preciso para definir os valores dos expoentes de corte: uma possibilidade seria tentar defini-los por meio da taxa de decaimento da curva. No entanto seria de certo modo arbitrário estabelecer o valor da taxa de decaimento que define o ponto de corte. Em decorrência da arbitrariedade da definição do expoente de corte, optamos por simplesmente definir λ_- e λ_+ através de uma simples inspeção visual, uma vez que a determinação precisa destes valores não altera os resultados pretendidos no presente trabalho. Por exemplo, para a energia $E = 1/8$ adotamos $\lambda_- = 0,001$ e $\lambda_+ = 0,035$, valores representados como linhas tracejadas na fig. 4.9. No limite de $t \rightarrow \infty$, se espera que o número de órbitas com valores intermediarios, $\lambda_- < \lambda < \lambda_+$, tenda a zero.

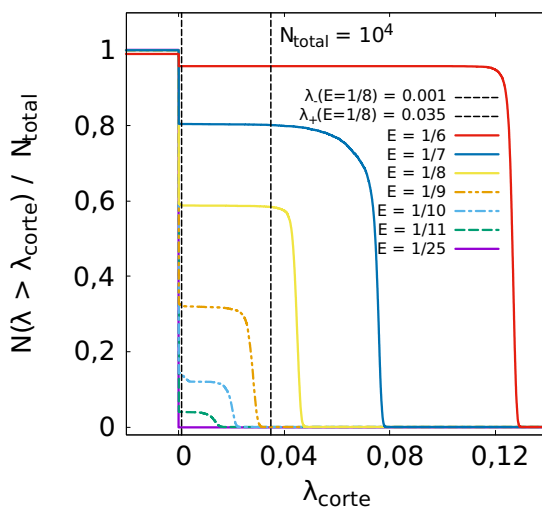


Figura 4.9: Número relativo de condições iniciais com expoente de Lyapunov maior que o de corte, $N(\lambda > \lambda_{\text{corte}})$, em função do λ_{corte} . As linhas tracejadas correspondem aos pontos de corte, λ_- e λ_+ , utilizados para a energia $E = 1/8$.

O número de vezes (N) que uma órbita intercepta a superfície de Poincaré em um determinado intervalo de tempo depende das condições iniciais. Na fig. 4.10 é apresentado o histograma do número de intersecções do fluxo com a superfície Ω , ao evoluir o sistema até um tempo $t = 2 \times 10^6$, para a energia $E = 1/9$. Foram tomadas $M = 3 \times 10^6$ condições iniciais, para a construção do histograma. As cores vermelha e preta são utilizadas para representar, respectivamente, a distribuição das condições que possuem $\lambda > \lambda_+$ e $\lambda < \lambda_-$. A distribuição para $\lambda > \lambda_+$ é unimodal e restrita à região compacta entre 59×10^4 e 62×10^4 , ao passo que a distribuição para $\lambda < \lambda_-$ (cor preta), é multimodal. A fig. 4.11 detalha o caso caótico (curva vermelha da fig. 4.10). Na figura (a) fica claro que não é uma curva simétrica. A figura (b) tem na abscissa o valor centralizado do quadrado do número de cruzamentos, com escala logarítmica na ordenada. Esta representação permite perceber que a distribuição não é uma gaussiana (uma gaussiana apareceria como uma reta nesta representação) em toda a faixa de valores, mas apenas na região central, como se vê no detalhe. A assimetria da curva é refletida na figura (b) pelos dois ramos separados (duas retas com inclinações diferentes, no detalhe). A

diferença do comportamento das distribuições pode ser compreendida ao observar que temos uma região caótica conexa, enquanto as regiões de quase periodicidade são desconexas com formação de várias ilhas quase-periódicas.

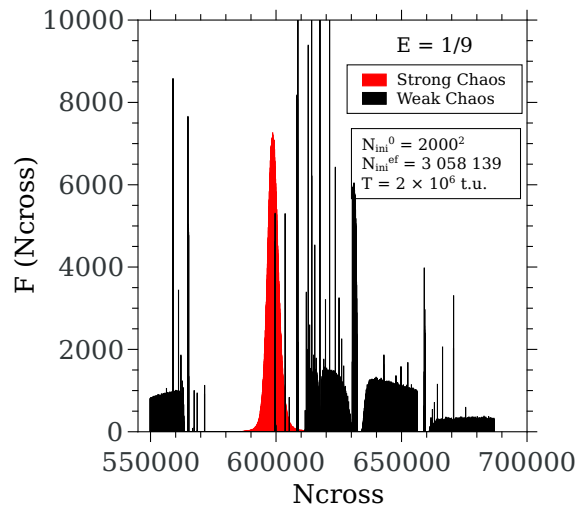


Figura 4.10: Número de vezes que a seção de Poincaré (Ω) é cruzada em ambos os sentidos $p_x > 0$ e $p_x < 0$, no intervalo de tempo $t = 2 \times 10^4$ (2×10^6 passos de integração com passo de integração de 10^{-2}) para a energia $E = 1/9$. Órbitas caóticas ($\lambda > \lambda_+$): vermelho; órbitas quase-periódicas ($\lambda < \lambda_-$): preto.

Em [50], órbitas do sistema Hénon-Heiles são classificadas de acordo com sua periodicidade. Ele apresenta diagramas para uma energia fixa, com diversas condições iniciais. Na presente dissertação, utilizamos outra representação, com diagramas para uma única condição inicial e diversas energias. O diagrama fig. 4.12 mostra o comportamento da variável p_y para uma única condição inicial, no caso, $(x = 0, y = 0, p_y = 0)$, ao evoluir no espaço de fases, para diferentes energias. Cada vez que a trajetória cruza a secção de Poincaré no sentido $p_x > 0$, marca-se o valor de p_y no diagrama 4.12. Esta figura foi feita com o número de intersecções $N = 100$, com energias variando entre $E = 1/12$ até $E = 1/6$, com incremento $\Delta E = 2,8 \times 10^{-5}$. Avaliamos diagramas deste tipo para diferentes condições iniciais. Apresentamos aqui o caso $(x = 0, y = 0, p_y = 0)$ como representativo. A fig. 4.12 (c) exibe o expoente de Lyapunov nas mesmas energias representadas pela fig. 4.12 (a). Observamos que as regiões quase-periódicas e regiões caóticas, identificadas pela fig. 4.12 (c), apresentam padrões diferenciados no diagrama 4.12 (a). A fig. (a) sugere, por exemplo, uma órbita com período 3 e também com período 7, esta última detalhada na fig. 4.12 (b)². Observando a região próxima do período 7, na fig. 4.12 (b), notamos a existência de uma trama peculiar, indicando que a órbita não é caótica. Algumas regiões vistas como completamente preenchidas, i.e., escuras, no diagrama 4.12 (a), por exemplo, para $E = 0,1$, se devidamente ampliadas, apresentam trama similar. Isso significa que tratam-se de órbitas quase-periódicas, como indicam os valores dos expoentes de Lyapunov da fig. 4.12 (c). A fig. 4.12 (d) detalha a região predominantemente caótica. Algumas órbitas preenchem toda a faixa de valores acessíveis para p_y . No diagrama, a figura aparenta uma certa granulosidade nessas regiões, consequência do número finito de

²É necessário uma avaliação com maior acurácia para confirmar se o que estamos nos referindo a período 3 e 7 são pontos neste diagrama, ou se são pequenas regiões com infinitos pontos. Mas é certo que trata-se de uma região periódica.

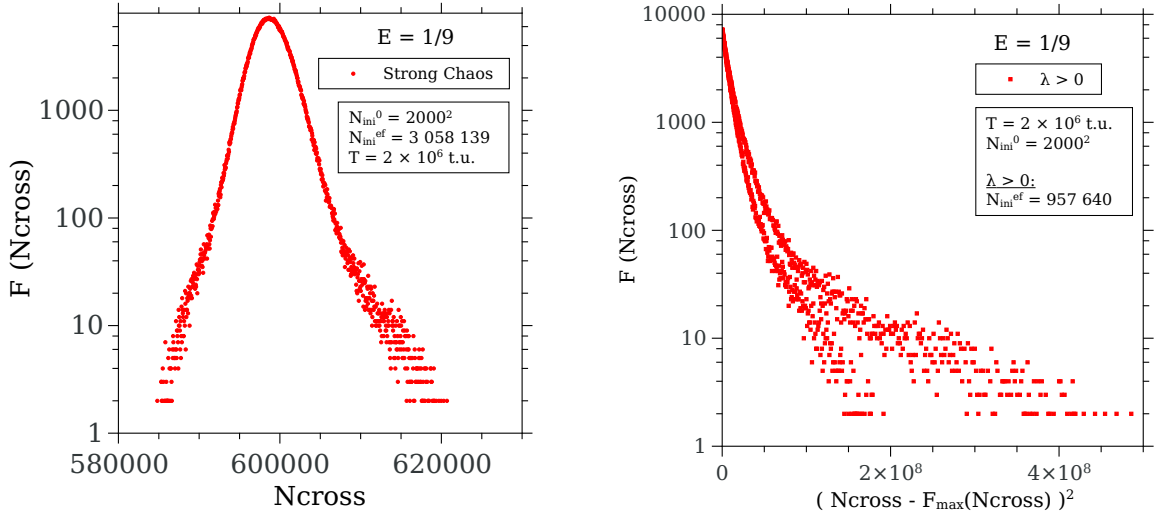


Figura 4.11: Detalhe da figura 4.10 para órbitas caóticas. (a) representação log-linear; (b) abscissa com valor centralizado do quadrado do número de cruzamentos, ordenada em escala logarítmica. Detalhe: região central.

pontos. Para tempo tendendo a infinito, toda a faixa de valores ficaria preenchida.

Foram encontradas coexistência de distribuições gaussianas e q -gaussianas nos mapas padrão e *web*, ambos conservativos [30, 31, 39]. Vamos verificar se o mesmo ocorre no sistema HH. Inicialmente analisamos distribuições da variável definida pela eq. (4.17) para M condições iniciais contidas na região caótica do sistema HH para a energia $E = 1/9$, parte laranja da fig. 4.8 (c). A expectativa seria encontrar gaussianas, como, em geral ocorre nos casos completamente caóticos (vide, p. ex., [30, 31, 39]). A figura 4.13 apresenta os resultados obtidos, juntamente com o ajuste de uma curva gaussiana:

$$\rho_1(\delta_{p_y}) = \sqrt{\frac{\beta_1}{\pi}} e^{-\beta_1(\delta_{p_y} - \mu_{p_y})^2}, \quad (4.23)$$

sendo μ_{p_y} o valor médio de p_y . Este exemplo específico foi obtido tomando-se as intersecções com a superfície Ω em ambos os sentidos $p_x > 0$ e $p_x < 0$, e todas as realizações feitas com o mesmo tempo convencional (na figura, identificado pelo número de passos de integração $t_F = 2 \times 10^6$). A figura apresenta a parte central da distribuição, onde se percebe que o ajuste é razoável. A cauda aparenta desvios da gaussiana. Com os pontos disponíveis, não podemos precisar se esses desvios são consequência de efeito de tamanho finito da amostra, ou se são persistentes. A região caótica do mapa *web*, para alguns valores de seu parâmetro de controle, também é caracterizada por uma distribuição gaussiana no centro, havendo desvios do tipo caudas longas (veja fig. 5 (a) de [30]). Naquele caso, esses desvios são consequências do efeito de um comportamento *sticky* (pegajoso, em uma tradução livre). Os possíveis desvios nas caudas aqui observados podem ser consequência do mesmo efeito, ou de outro — são necessárias investigações adicionais.

A distribuição da mesma variável $(\delta_{p_y})^2$ para condições iniciais tomadas na região quase-periódica, região preta da fig. 4.8 (c), para a mesma energia $E = 1/9$, é apresentada na figura 4.14. Vê-se também o ajuste de uma q -gaussiana (veja também a seção 3.2),

$$\rho_q(\delta_{p_y}) = A_q \sqrt{\beta_q} e^{-\beta_q(\delta_{p_y} - \mu_{p_y})^2}, \quad (4.24)$$

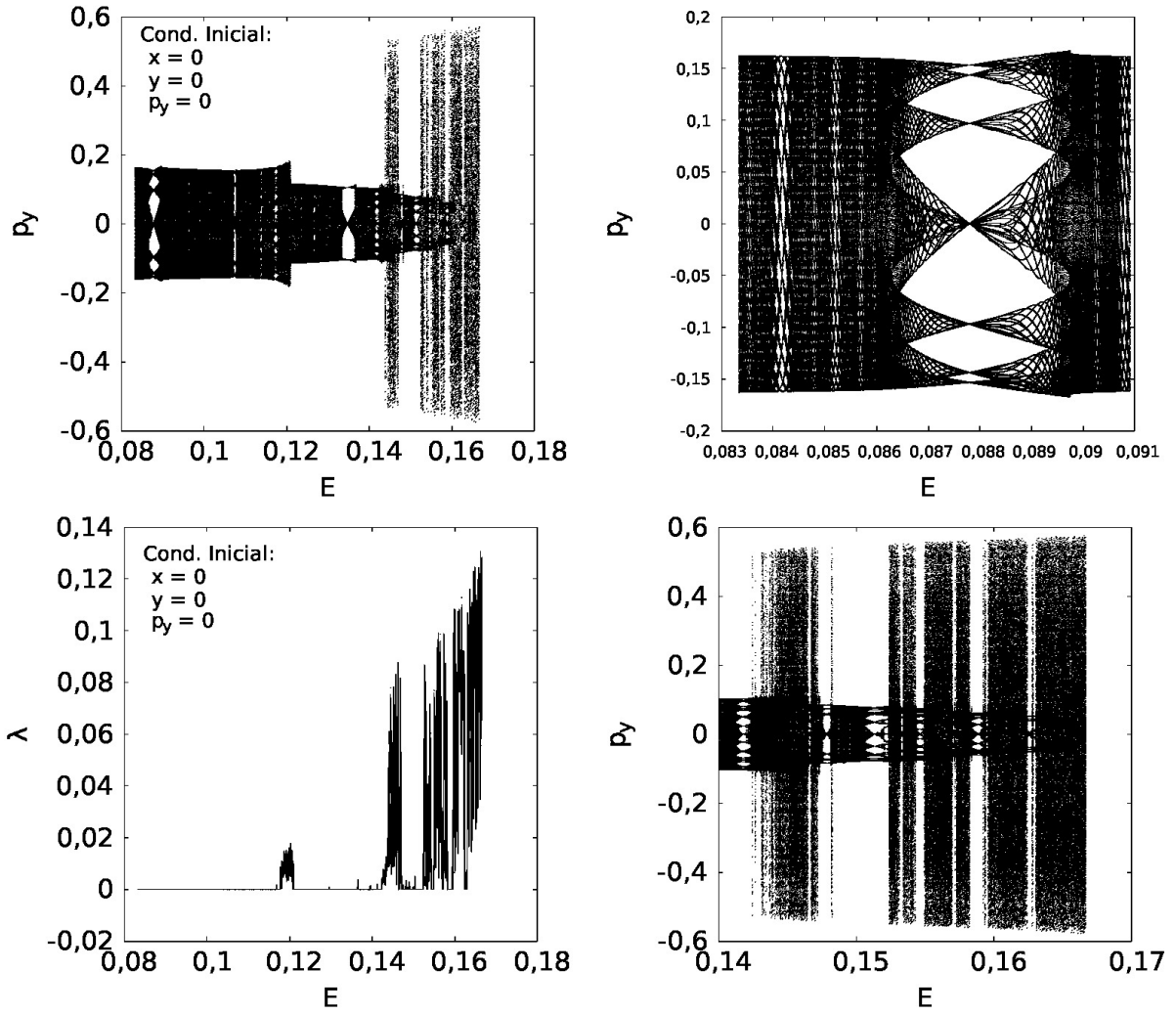


Figura 4.12: Diagrama da variável p_y em função da energia. Os valores de p_y foram tomados sobre a seção de Poincaré. $M = 2^x$

com

$$A_q = \begin{cases} \frac{\Gamma\left[\frac{5-3q}{2(1-q)}\right]}{\Gamma\left[\frac{2-q}{1-q}\right]} \sqrt{\frac{1-q}{\pi}}, & q < 1 \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}}, & q = 1 \\ \frac{\Gamma\left[\frac{1}{q-1}\right]}{\Gamma\left[\frac{3-q}{2(q-1)}\right]} \sqrt{\frac{q-1}{\pi}}, & 1 < q < 3 \end{cases} \quad (4.25)$$

Aqui também a parte central da distribuição aparenta ser bem representada, agora pela equação (4.24). Vê-se também flutuações na cauda, possivelmente em consequência de efeito de tamanho finito.

Seguindo os passos das referências [30, 31, 39], consideramos condições iniciais dispostas em todo o espaço de fases acessível (vide fig. 4.8 (c)), incluindo ambas as regiões caótica e quase-periódica, para a energia $E = 1/9$. A curva vermelha é a combinação linear de uma gaussiana, eq. (4.23), com uma q -gaussiana, eq. (4.24):

$$\rho(\delta_{p_y}) = \alpha_1 \rho_1(\delta_{p_y}) + \alpha_q \rho_q(\delta_{p_y}). \quad (4.26)$$

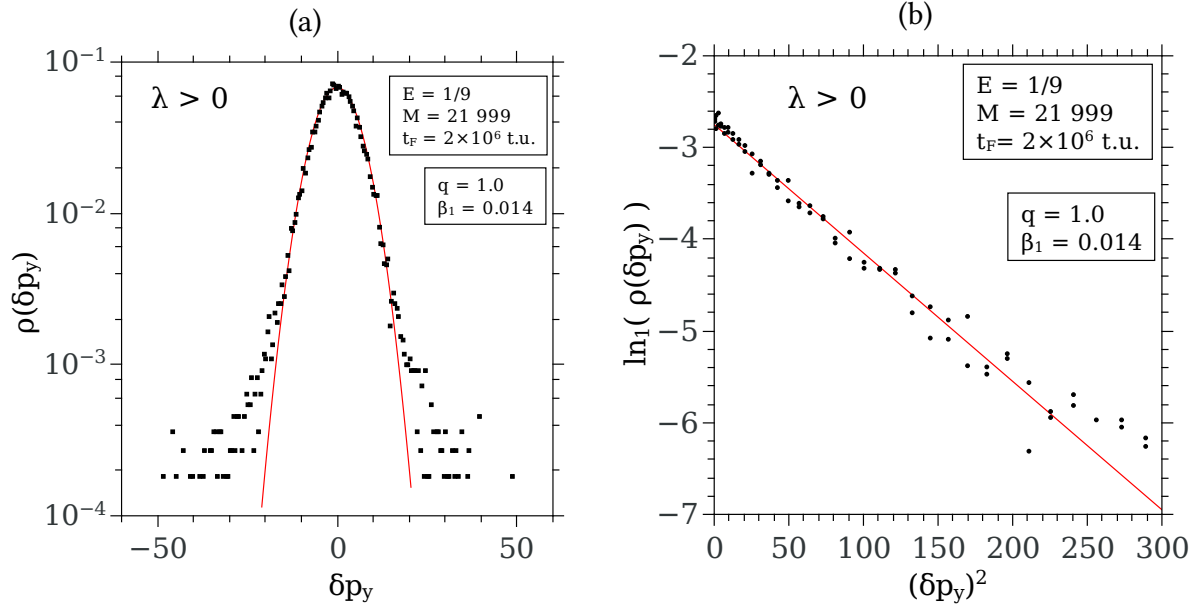


Figura 4.13: Densidade de probabilidade da variável δp_y para a energia $E = 1/9$. Condições iniciais tomadas na região caótica. Considerados ambos os sentidos $p_x > 0$ e $p_x < 0$. $N = 21999$ condições iniciais com tempo convencional fixo, $t_F = 2 \times 10^6$ passos de integração. Curva vermelha corresponde ao ajuste de uma distribuição gaussiana, eq. (4.23), com $\beta_1 = 0,014$. (a) escala mono-log, quando uma gaussiana se apresenta como uma parábola; (b) abscissa com $(\delta p_y)^2$, e ordenada com o logaritmo natural da densidade de probabilidade, quando uma gaussiana se apresenta como uma linha reta.

O coeficiente α_1 é obtido pela fração da área correspondente à região caótica (região laranja) em relação à área total do espaço de fases na fig. 4.8 (c). É estimado através da razão entre o número de condições iniciais para o caso caótico em relação ao número total de condições iniciais:

$$\alpha_1 = \frac{M(\lambda > \lambda_+)}{M(\forall \lambda)}. \quad (4.27)$$

O coeficiente α_q tem significado similar: corresponde à fração de área ocupada pela região quase-periódica (região preta da fig. 4.8 (c)) em relação à área total do espaço de fases. Seria, portanto, estimado de modo similar à eq. (4.27):

$$\alpha_q = \frac{M(\lambda < \lambda_-)}{M(\forall \lambda)}. \quad (4.28)$$

Entretanto, este procedimento excluiria as condições iniciais contidas no intervalo (λ_-, λ_+) . Isso implicaria que a equação (4.26) não seria normalizada, mesmo que as distribuições $\rho_1(\delta p_y)$ e $\rho_q(\delta p_y)$ o fossem. A quantidade destes pontos intermediários é desprezível, e se espera que tenda a zero no limite de $t \rightarrow \infty$, como explicamos anteriormente, ao tratar a fig. 4.9. Para evitar essa inconsistência, embora pequena, estimamos α_q por

$$\alpha_q = 1 - \alpha_1. \quad (4.29)$$

É de se notar que estes coeficientes α_1 e α_q não são parâmetros ajustáveis. Os parâmetros β_1 , β_q e q são os mesmos obtidos para os casos completamente caótico e quase-periódico, respectivamente. Dessa forma, também não são ajustados pelos dados provenientes exclusivamente

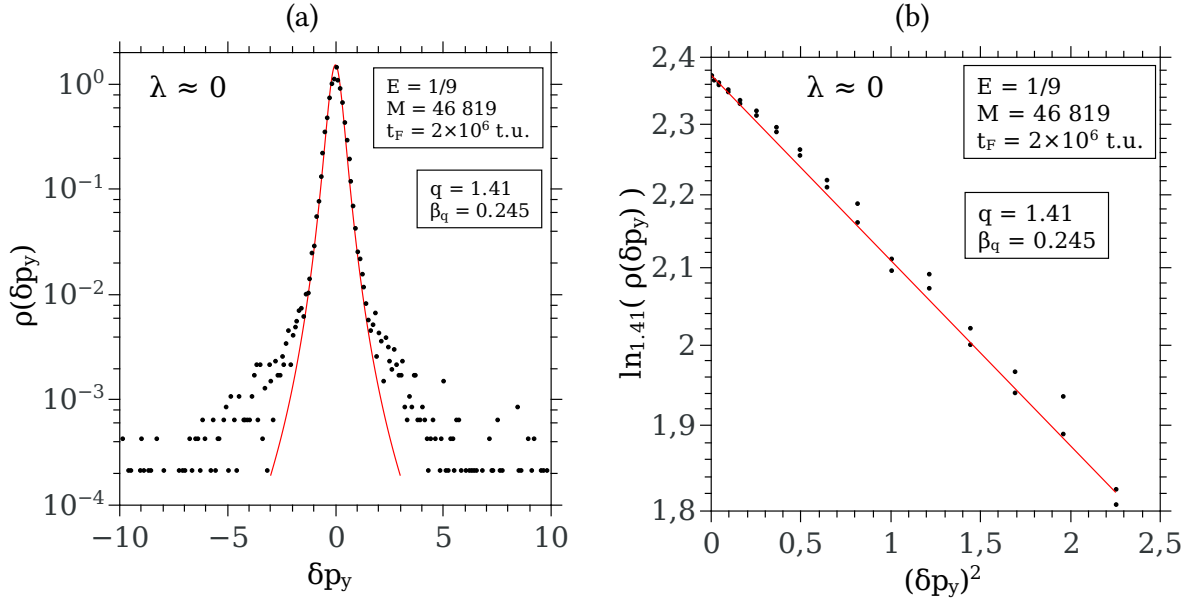


Figura 4.14: Densidade de probabilidade para variável δp_y para a energia $E = 1/9$. Condições iniciais tomadas na região quase-periódica. Considerados ambos os sentidos $p_x > 0$ e $p_x < 0$. $N = 46819$ condições iniciais com tempo convencional fixo, $t_F = 2 \times 10^6$ passos de integração. Curva vermelha corresponde ao ajuste de uma distribuição q -gaussiana, eq. (4.24), com $q = 1.41$ e $\beta_q = 0.245$. (a) escala mono-log; (b) abscissa com $(\delta p_y)^2$, e ordenada com o q -logaritmo da densidade de probabilidade. Uma q -gaussiana se apresenta como uma linha reta nesta representação desde que o valor do parâmetro q esteja devidamente ajustado (no caso, $q = 1.41$).

do caso de condições iniciais distribuídas em todo o espaço de fases. A figura 4.15 apresenta os resultados obtidos, e a curva dada pela equação 4.28. Comportamento similar foi observado para o mapa padrão e para o mapa *web* [30, 31, 39].

A figura 4.16 apresenta a distribuição para esta mesma energia $E = 1/9$, com mais condições iniciais ($M \approx 3 \times 10^6$). Na parte da cauda da distribuição, onde predominam as flutuações, parece emergir algum padrão, com picos (veja figuras (a) e (b)), que podem não ser apenas flutuações. A figura (c) corresponde à figura 4.15. A figura (d) apresenta uma ampliação da sua parte central, onde foi ajustada uma q -gaussiana na fig. 4.15. Agora, com mais condições iniciais, percebemos que esta parte central não tem exclusivamente uma q -gaussiana com $q = 1.41$. A curva é assimétrica e possivelmente é a superposição de duas outras distribuições; a q -gaussiana com $q = 1.41$ é um comportamento aproximado, observado em uma escala de resolução menos refinada.

A figura 4.17 apresenta histogramas para a energia $E = 1/8$ para condições iniciais na região caótica (região amarela da figura 4.8 (d)). Assim como verificado no caso $E = 1/9$ (fig. 4.13, e aqui mais pronunciado que ali, por haver mais condições iniciais), a gaussiana não parece descrever toda a faixa de dados para a região caótica na energia $E = 1/8$, mas apenas sua parte central. Isso reforça a suspeita da existência de órbitas *sticky* no mar caótico.

A figura 4.18 apresenta histogramas para a energia $E = 1/8$ para condições iniciais na região quase-periódica (região preta da figura 4.8 (d)). A região da cauda, observada na figura (a), parece apresentar um padrão que não é apenas consequência de flutuações estatísticas por conta de tamanho finito da amostra. A figura (b) mostra uma ampliação da parte central, com seu detalhe ainda mais ampliado. A ocorrência de pelo menos dois pequenos máximos fora do centro pode ser indicativo da superposição de duas distribuições não gaussianas, talvez duas

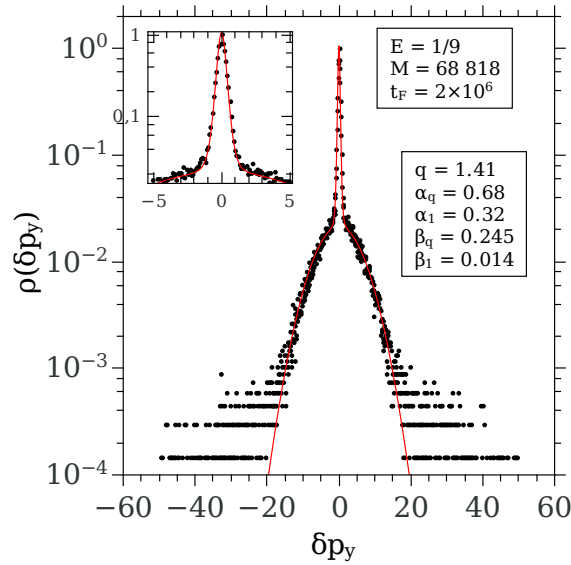


Figura 4.15: Densidade de probabilidade para a variável δp_y para a energia $E = 1/9$. Condições iniciais tomadas em todo espaço de fases. Considerados ambos os sentidos $p_x > 0$ e $p_x < 0$. $N = 68818$ condições iniciais com tempo convencional fixo, $t_F = 2 \times 10^6$ passos de integração. Curva vermelha corresponde ao ajuste da combinação linear entre uma gaussiana e uma q -gaussiana, eq. (4.26). Valores dos parâmetros indicados na figura. Painel principal: escala mono-log; Detalhe: ampliação da parte central, na mesma escala.

q -gaussianas. A figura (c), com o quadrado da variável independente na abscissa, deixa mais evidente a existência de dois, ou talvez três, regiões com inclinações diferentes, separadas por pequenos máximos. Trata-se de um padrão mais complexo que aquele da figura 4.14. Isso pode ser por dois motivos, não mutuamente excludentes: as energias são diferentes, e esta figura 4.18 foi avaliada com mais condições iniciais. A figura 4.19 apresenta os histogramas para órbitas tomadas em todo o espaço de fases exibido na figura 4.8.

A figura 4.20 apresenta distribuições de densidade de probabilidade para a variável δp_y avaliadas com o tempo convencional, isto é, avaliadas a cada passo de integração, em vez de tomá-las apenas quando cruzam a secção de Poincaré. A primeira coluna apresenta os resultados para órbitas caóticas. A segunda coluna apresenta os resultados para órbitas quase-periódicas. A terceira coluna apresenta os resultados para órbitas tomadas em todo espaço de fases. Percebe-se que as distribuições não são exatamente gaussianas em nenhum caso. Também todas as curvas apresentam algum grau de assimetria.

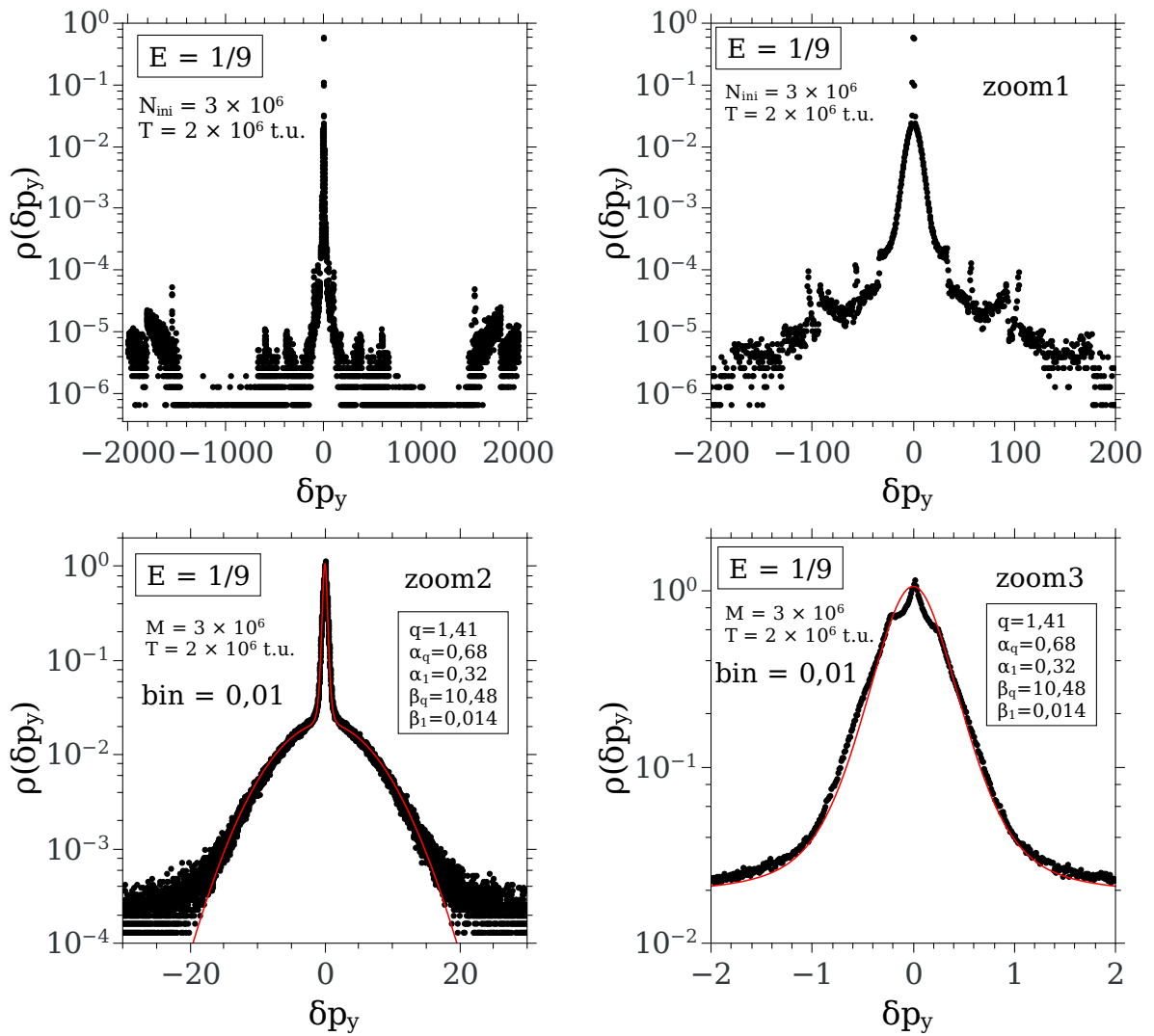


Figura 4.16: Densidade de probabilidade para a variável δp_y para a energia $E = 1/9$. Condições iniciais tomadas em todo espaço de fases. Considerados ambos os sentidos $p_x > 0$ e $p_x < 0$. $M = 3\,058\,139$ condições iniciais, com tempo convencional fixo, $t_F = 2 \times 10^6$ passos de integração (a legenda da figura usa N_{ini} em vez de M , e T em vez de t_F , e apresenta valor aproximado de M). Painéis (a)–(d): sucessivas ampliações da mesma distribuição.

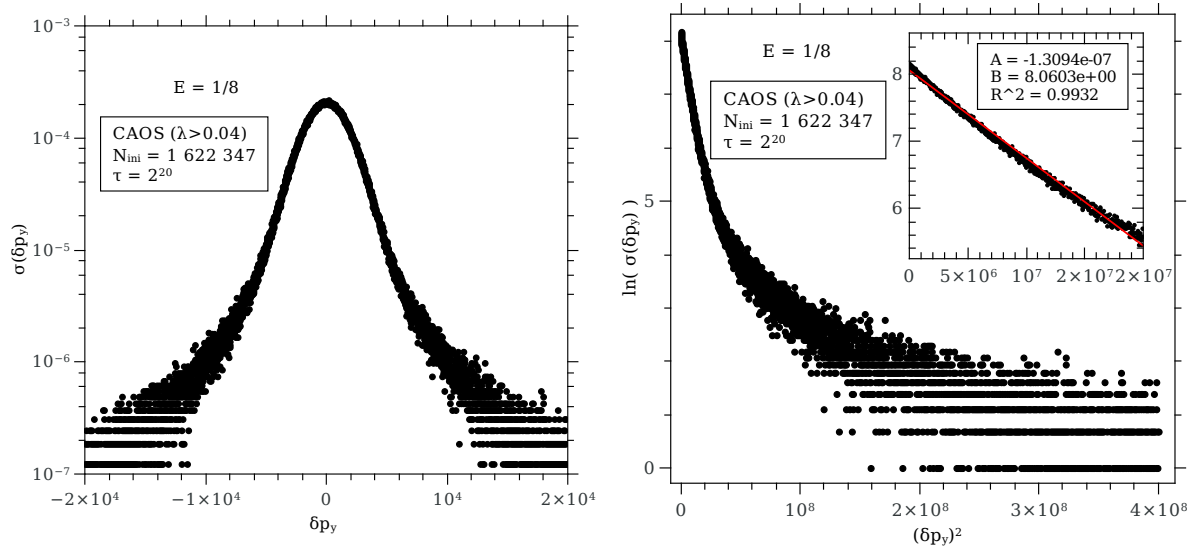


Figura 4.17: Histogramas (não normalizados) para a variável δp_y para a energia $E = 1/8$. Condições iniciais tomadas na região caótica. Considerados ambos os sentidos $p_x > 0$ e $p_x < 0$. $M = 1\,622\,347$ condições iniciais, com tempo natural fixo $N = 2^{20}$ (a legenda da figura usa N_{ini} em vez de M , e τ em vez de N). (a) escala log-linear; (b) abscissa com $(\delta p_y)^2$, e ordenada com o logaritmo do histograma. Detalhe de (b): ajuste de uma gaussiana ($Be^{-A(\delta p_y)^2}$, na notação da legenda) para a porção inicial dos dados.

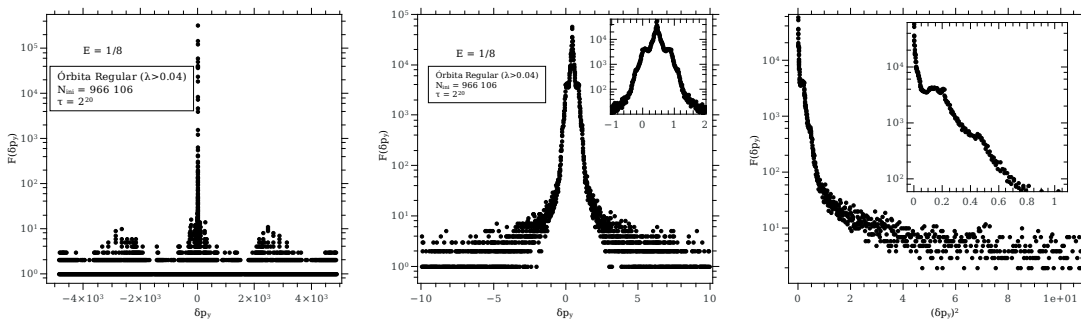


Figura 4.18: Histogramas (não normalizados) para a variável δp_y para a energia $E = 1/8$. Condições iniciais tomadas na região quase-periódica. Considerados ambos os sentidos $p_x > 0$ e $p_x < 0$. $M = 966\,106$ condições iniciais, com tempo natural fixo $N = 2^{20}$ (a legenda da figura usa N_{ini} em vez de M , e τ em vez de N). (a) escala log-linear; (b) ampliação da figura (a), detalhe com ampliação adicional. (c) abscissa com $(\delta p_y)^2$, e ordenada com o logaritmo do histograma. Detalhe de (c): ampliação do painel principal.

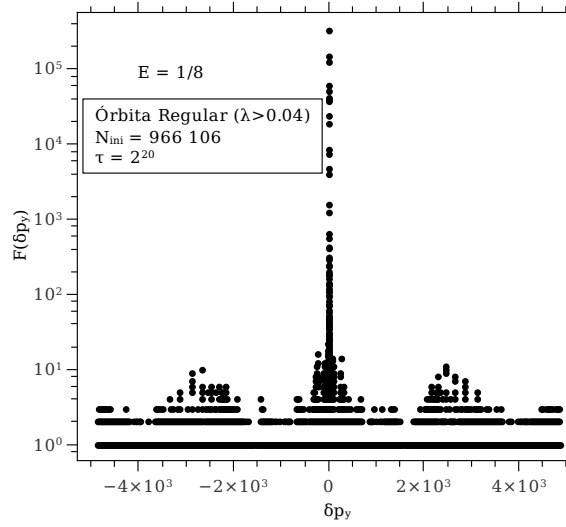


Figura 4.19: Histograma (não normalizado) para a variável δ_{p_y} para a energia $E = 1/8$. Condições iniciais tomadas em todo espaço de fases. Considerados ambos os sentidos $p_x > 0$ e $p_x < 0$. $M = 2\,690\,930$ condições iniciais, com tempo natural fixo $N = 2^{20}$ (a legenda da figura usa N_{ini} em vez de M , e τ em vez de N), em escala log-linear. Detalhe com aplicação da parte central.

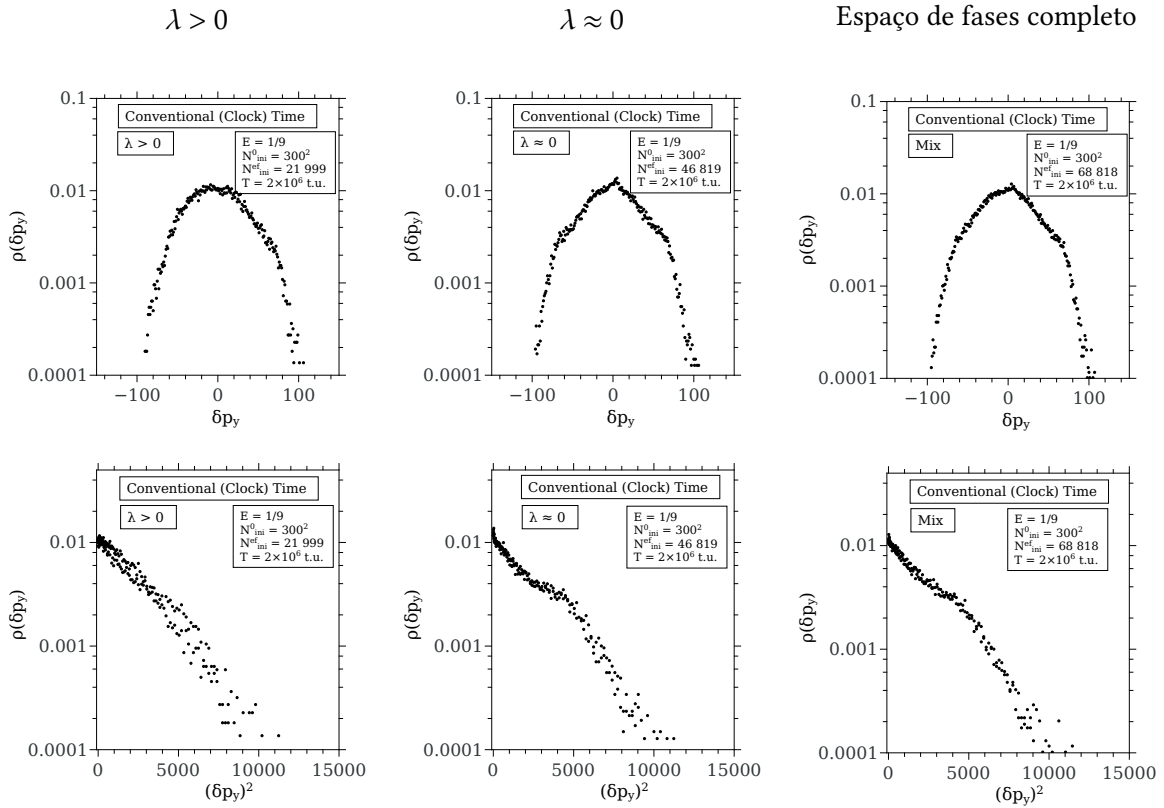


Figura 4.20: Densidades de probabilidade para a variável δ_{p_y} para a energia $E = 1/9$, avaliadas para o tempo convencional (*clock time*). Ordenada em escala logarítmica. Primeira coluna: órbitas caóticas; segunda coluna: órbitas quase-periódicas; terceira coluna: espaço de fases completo. Linha superior: abscissa com δ_{p_y} ; Linha inferior: abscissa com $(\delta_{p_y})^2$ (as legendas das figuras usam N_{ini} em vez de M , e T em vez de t_F).

Capítulo 5

Potenciais tipo Lennard-Jones

Este capítulo é dedicado ao estudo de potenciais do tipo Lennard-Jones definidos pelo Hamiltoniano

$$\tilde{\mathcal{H}} = K + \frac{V}{\tilde{N}} + V_{\text{paredes}}, \quad (5.1)$$

onde K representa a energia cinética total das N partículas de massa m ,

$$K = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N p_i^2, \quad (5.2)$$

V_{paredes} , o potencial de repulsão das paredes sobre as partículas,

$$V_{\text{paredes}} = \sum_{w=1}^4 \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{r_{iw}} \right)^{12}, \quad (5.3)$$

e V é o potencial para o sistema com N partículas. Adotando a aproximação entre pares (*pairwise additivity*), V é dado pelo somatório das energias potenciais entre pares de partículas,

$$V = \sum_{i<j}^N v(r_{ij}), \quad (5.4)$$

sendo $v(r_{ij})$ o potencial de Mie.

O potencial de Mie [18] possui um termo de atração e outro de repulsão,

$$v(r_{ij}) = C_\alpha \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^\eta - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^\alpha \right], \quad (0 \leq \alpha < \eta), \quad (5.5)$$

onde σ é o diâmetro da partícula e r_{ij} a distância entre as partículas i e j . Os parâmetros α e η regulam, respectivamente, o alcance da interação de atração e o de repulsão. O potencial 5.5 é do tipo: $v(r_{ij}) \propto 1/r_{ij}^\alpha$, logo, é não extensivo para $0 \leq \alpha < d$. Como mostrado na seção 3.3, é possível escalar o potencial de modo a torná-lo extensivo. Este escalonamento é realizado na equação 5.1 por meio do parâmetro \tilde{N} (Eq. 3.37).

A ocasião em que $r_{ij} = \sigma$ corresponde à distância finita na qual o potencial entre um par de partículas é nulo. A distância que fornece energia potencial mínima (v_{\min}) entre duas partículas é obtida através da primeira derivada,

$$\frac{dv(r_{ij})}{dr_{ij}} = 0,$$

sendo C_α uma constante. Temos

$$\begin{aligned} -\eta \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{\eta-1} \frac{\sigma}{r_{ij}^2} + \alpha \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{\alpha-1} \frac{\sigma}{r_{ij}^2} &= 0, \\ \alpha \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{\alpha-1} &= \eta \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{\eta-1}, \\ \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{\alpha-1} \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{-(\eta-1)} &= \frac{\eta}{\alpha}, \\ \left(\frac{r_{ij}}{\sigma} \right)^{(\eta-\alpha)} &= \frac{\eta}{\alpha}, \end{aligned}$$

e assim

$$r_{min} = \left(\frac{\eta}{\alpha} \right)^{1/(\eta-\alpha)} \sigma. \quad (5.6)$$

O potencial é repulsivo para $r_{ij} < r_{min}$, e atrativo para $r_{ij} > r_{min}$ (veja figura 5.1). C_α é uma constante empregada para fixar a profundidade do poço em ϵ para quaisquer que sejam os valores de α e η tal que $0 \leq \alpha < \eta$. Para determinar o valor de C_α basta fazer $v(r_{ij}) = \epsilon$ e $r_{ij} = r_{min}$ em 5.5, logo,

$$C_\alpha = \epsilon \frac{(\eta^\eta / \alpha^\alpha)^{1/(\eta-\alpha)}}{(\eta-\alpha)}. \quad (5.7)$$

A expressão 5.5 é intitulada de potencial de Lennard-Jones [23] quando utilizados os parâmetros $\alpha = 6$ e $\eta = 12$.

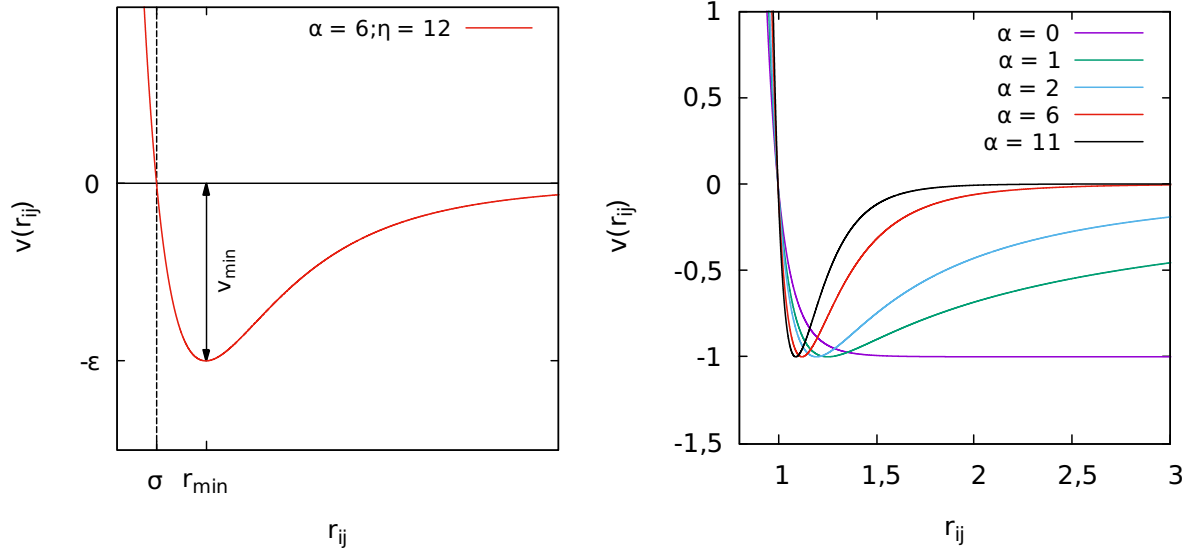


Figura 5.1: Potencial tipo Lennard-Jones com $\alpha = 6$ e $\eta = 12$. A linha pontilhada vertical corresponde ao raio da partícula (σ). O potencial é repulsivo, para $r < r_{min}$ e atrativo para $r > r_{min}$. Quando $r_{ij} \rightarrow \infty$ o potencial $V(r_{ij})$ tende a zero, para $\alpha \neq 0$.

5.1 Procedimentos

A simulação da dinâmica molecular (DM) e outras simulações realizadas no computador se assemelham em muitos aspectos a um experimento real. Por este motivo estas simulações são por vezes referidas como experimento *in silico*, uma alusão aos termos em latim *in vivo* e *in vitro*. O livro de Frenkel e Smit [16] faz este paralelo, entre os procedimentos realizados no experimento real e na simulação da DM. Os autores do livro dizem que ao realizar um experimento real as seguintes etapas são executadas: preparação da amostra do material que se deseja estudar; conexão dessa amostra aos instrumentos de medição e aferição das propriedades desejadas. Na simulação da dinâmica molecular procede-se de forma análoga. Prepara-se a amostra, isto é, é selecionado um sistema modelo e ajustadas as condições iniciais; em seguida são resolvidas as equações de movimento do sistema até que as propriedades estejam em equilíbrio. E por fim, efetuam-se as medidas.

Os códigos utilizados foram desenvolvidos em linguagem C++ com o objetivo exclusivo de desenvolvimento do presente trabalho, e posteriormente comparados com aqueles desenvolvidos pelo Orientador, em [7], aqueles em linguagem FORTRAN.

5.1.1 Ajuste das condições iniciais

O nosso sistema modelo é dado pelo Hamiltoniano 5.1, que fornece as seguintes equações de movimento:

$$\dot{\mathbf{q}}_i = \frac{1}{m} \mathbf{p}_i \quad (5.8)$$

$$\dot{\mathbf{p}}_i = 12\sigma^{12} \sum_{w=1}^4 \left(\frac{\mathbf{r}_{iw}}{r_{iw}^{14}} \right) + C_\alpha \sum_{i<j}^N \left[12\sigma^{12} \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}^{14}} - \alpha\sigma^\alpha \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}^{\alpha+2}} \right]. \quad (5.9)$$

A integração destas equações é realizada por meio do algoritmo simplético de Yoshida de quarta ordem (veja seção 1.2). Utilizamos neste capítulo unidades reduzidas¹, tomando m, σ e ϵ como unidade base para massa, comprimento e energia, respectivamente, com $m = \sigma = \epsilon = 1$.

Após selecionarmos o sistema modelo, devemos ajustar as condições iniciais do mesmo. Inicialmente as partículas são dispostas em uma caixa quadrada de largura L , na forma de um triângulo equilátero, com uma distância r_{min} (Eq. 5.6) entre as primeiras vizinhas, como mostrada na figura 5.2 a.

Para a condição inicial do momento linear, foi adotada uma distribuição uniforme de suporte compacto entre $(-p_c, p_c)$ com $(p_c > 0)$, conhecida como distribuição *water bag* (Fig.5.2 b). Para implementar a distribuição *water bag*, sorteamos as componentes do momento, p_x e p_y , dentro de um intervalo $(-p_c, p_c)$. Ao proceder dessa forma, o sistema terá um momento linear total não nulo ($\mathbf{P} = \sum_i^N \mathbf{p}_i \neq 0$). Para anulá-lo, basta subtrair do \mathbf{p}_i de cada partícula a média do momento linear:

$$\mathbf{p}_i - \frac{\sum_i^N \mathbf{p}_i}{N}.$$

Depois de anular o momento linear total, devemos ajustar a energia cinética, para que o valor do Hamiltoniano 5.1 se iguale à energia E especificada pelo o usuário. A energia cinética em função de E é dada por:

$$K_0 = E - U_0, \quad (5.10)$$

¹Apêndice B.

onde U_0 é a energia potencial, calculada a partir da disposição inicial das partículas, $U = \frac{V}{N} + V_{\text{parede}}$. Com a liberdade de escolha do ponto de referência para a energia potencial, adotamos $U_0 = 0$, e assim a energia do sistema fica sempre positiva. Para que a energia cinética do nosso sistema corresponda a 5.10 é preciso multiplicar o momento de cada partícula por um fator de escala ϕ ,

$$\phi \mathbf{p}_i,$$

sendo ϕ dado por:

$$\phi = \sqrt{\frac{K_0}{\frac{(\sum_i^N p_i^2)}{2}}}. \quad (5.11)$$

Em seguida, definimos o passo de integração.

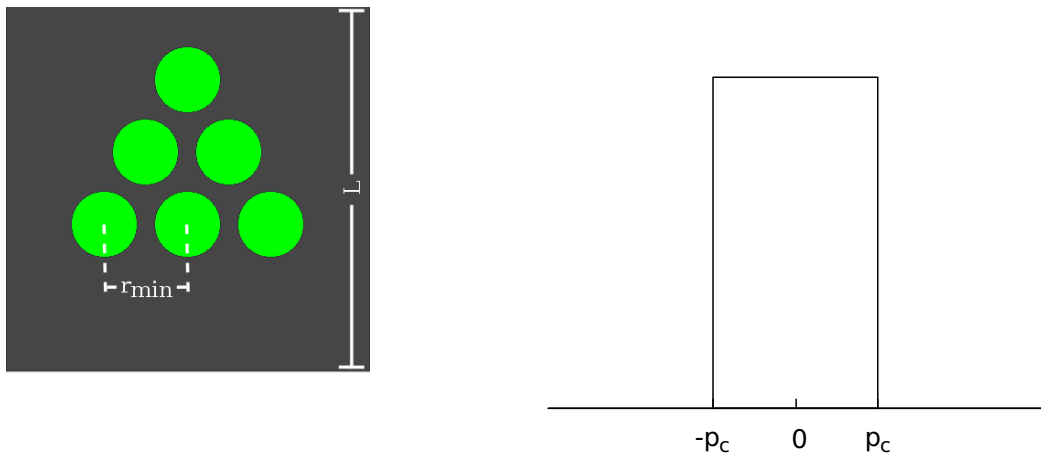


Figura 5.2: Condições iniciais para as posições e momentos.

Os gráficos da figura 5.3 apresentam o desvio relativo da energia em função do número de partículas (gráfico a esquerda), tamanho do passo (gráfico do centro) e energia (gráfico a direita). Nota-se por meio destes gráficos que o tamanho do passo, Δt , exerce maior influência sobre o desvio da energia do que as outras variáveis analisadas, mais especificamente $\Delta E/E$ cresce na forma de uma lei de potência, como pode ser verificado no gráfico interno da figura 5.3.(b), em escala log-log. Baseado no estudo destes gráficos e no tempo de simulação, adotamos $\Delta t = 0,005$ como passo de integração, para todas as simulações que aparecem neste capítulo.

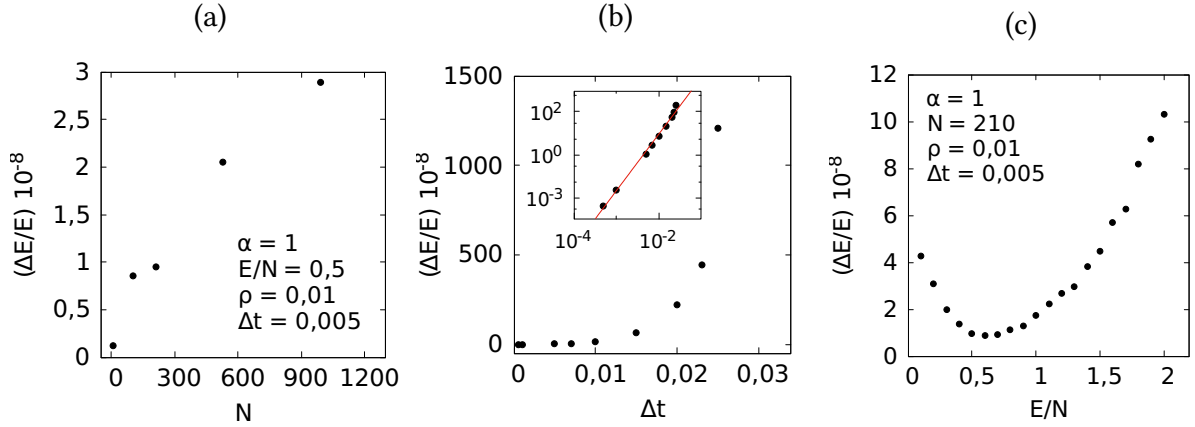


Figura 5.3: Desvio relativo da energia em função do:(a) número de partículas N ; (b) passo de integração ΔT em escala linear e log-log (figura interna); (c) energia por partícula E/N .

5.2 Resultados

5.2.1 Evolução temporal da energia cinética

Os resultados apresentados para a evolução temporal da energia cinética e das curvas calóricas são médias obtidas sobre 10 amostras, com diferentes condições iniciais para o momento \mathbf{p}_i , mas mantendo-se constantes as demais variáveis e parâmetros. Usamos o símbolo $\langle K \rangle$ para representar a média da energia cinética tomada sobre estas 10 amostras.

A figura 5.4 exibe a evolução temporal da energia cinética média por partícula para um potencial de curto alcance, $\alpha = 6$. Note que $\langle K \rangle/N = E/N$ no instante inicial, isto ocorre devido o deslocamento do valor da energia potencial que realizamos para torná-lo nulo quando disposto na configuração inicial. Para todas as energias analisadas $\langle K \rangle/N$ decai inicialmente e logo em seguida ($t < 10^0$) sofre um aumento. Para baixas energias, $E/N = 0,2$ por exemplo, $\langle K \rangle/N$ se estabiliza logo após este incremento. Para outras energias este aumento ocorre até alcançar um ponto de máximo local (veja na fig.5.4 os gráficos com $E/N \geq 1,0$), em seguida volta a decair e fica quase constante por um breve tempo, até $t = 10^2$ aproximadamente, depois volta a decair novamente até atingir o “equilíbrio” termodinâmico.

No instante inicial, até atingir o primeiro ponto de máximo local, a curva de evolução temporal de $\langle K \rangle/N$ para o potencial de longo alcance (fig.5.5), com $\alpha = 1$, é similar à obtida para o caso de curto alcance (fig.5.4), $\alpha = 6$. Após este ponto de máximo ela se difere da de curto alcance, pois surge um ponto de mínimo local próximo a $t = 10^2$, não observado no caso com $\alpha = 6$. Com o aumento da energia este ponto de mínimo vai se esvaecendo, ao atingir $E/N \approx 0,75$ ele desaparece por completo. O equilíbrio termodinâmico é atingido em um patamar mais alto que o ponto de mínimo local, quando $E/N < (0,75 - \delta)$, e mais baixo, quando $(0,75 - \delta) < E/N \leq 0,75$ (δ representa um valor da ordem de 10^{-2}).

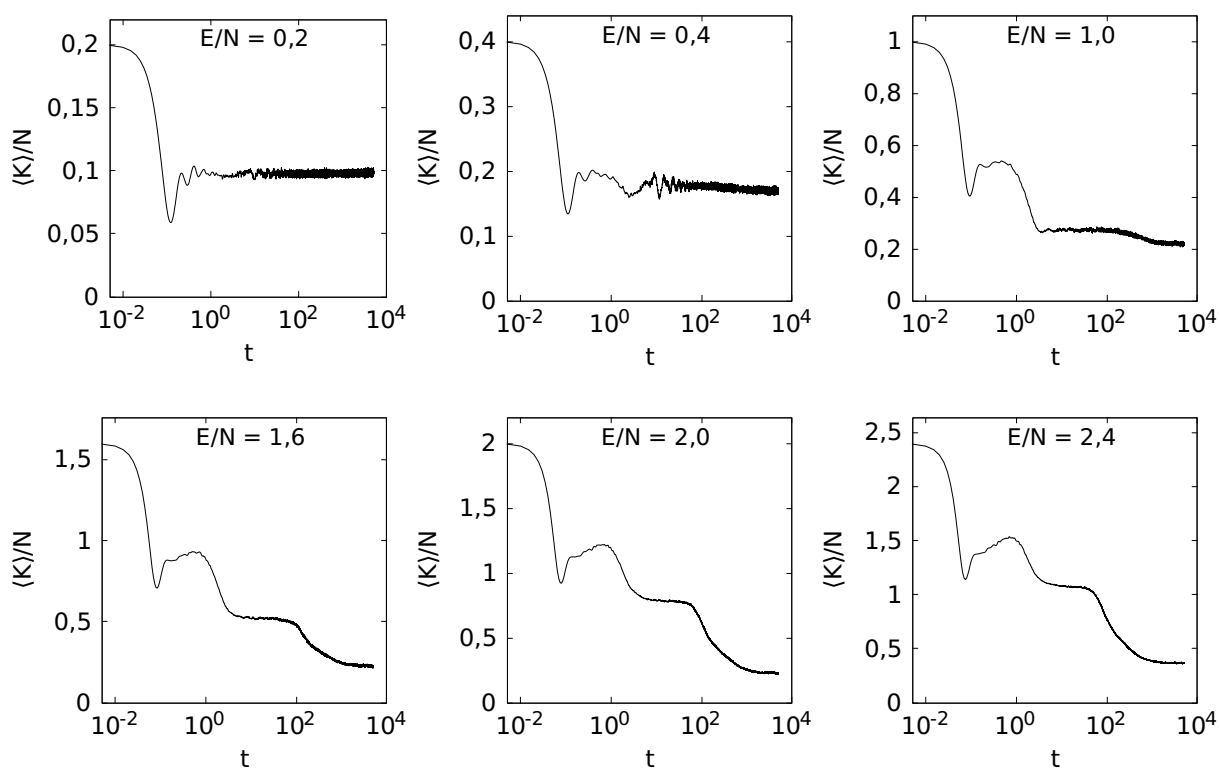


Figura 5.4: Evolução temporal da energia cinética média por partícula para uma interação de curto alcance, para diferentes valores de energia E/N . Para cada energia foram realizadas 10 simulações, com $\alpha = 6$, $N = 406$, $\rho = 10^{-2}$.

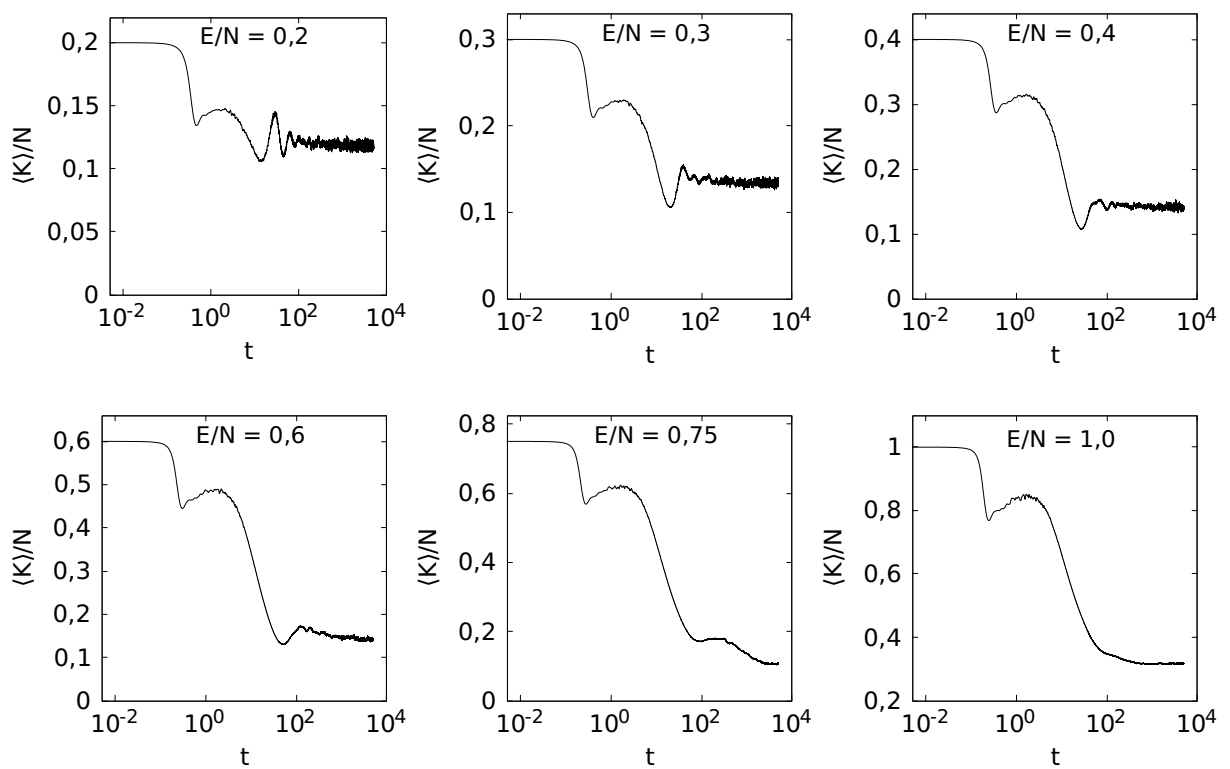


Figura 5.5: Evolução temporal da energia cinética média por partícula para uma interação de longo alcance, para diferentes valores de energia E/N . Para cada energia foram realizadas 10 simulações, com $\alpha = 1$, $N = 406$, $\rho = 10^{-2}$.

5.2.2 Curva calórica

A partir da análise da evolução temporal da energia cinética $\langle K \rangle/N$, construímos as curvas calóricas 5.6, tomando-se médias temporais na região de equilíbrio termodinâmico. A figura 5.6 mostra as curvas calóricas para os sistemas de curto alcance (figura da esquerda com $\alpha = 6$) e de longo alcance (figura da direita com $\alpha = 1$), com $N = 406$ partículas e densidade $\rho = 0,01$. A curva calórica, para o potencial de curto alcance, apresenta calor específico (C) (inverso da derivada da curva na figura 5.6) positivo quando $E/N < 0,7$. No intervalo $0,7 < E/N < 2,0$ o sistema apresenta calor específico nulo, isto é, ocorre uma transição do tipo líquido-gás. Para valores em que $E/N \geq 2,0$, o calor específico volta a ser positivo e constante. Chamaremos este ponto, a partir do qual C é positivo e constante, de energia crítica (E_{crit}). Para o sistema de longo alcance ($\alpha = 1$), a curva calórica apresenta calor específico positivo quando $E/N \leq 0,6$ e negativo no intervalo $0,6 \leq E/N < 0,75$, com $E_{\text{crit}} \approx 0,75$. Ao se atingir a energia crítica E_{crit} , mais de 80% da energia total está sob a forma de energia potencial (veja fig.5.7.(a)), após este valor ($E/N > E_{\text{crit}}$) a energia potencial passa a crescer bem mais lentamente, ficando quase estável com um valor de $U/N \approx 0,68$, como exibido fig.5.7.(b).

A região de calor específico negativo se manifesta apenas no caso de longo alcance. Este estranho comportamento, calor específico negativo, vem sendo relatado em artigos sobre aglomerados de estrelas [25,38], agrupamentos atômicos [34] e fragmentação de núcleos [15]. Este resultado, mostrando a ocorrência de $C < 0$ no sistema tipo Lennard-Jones, já havia sido reportado em [6].

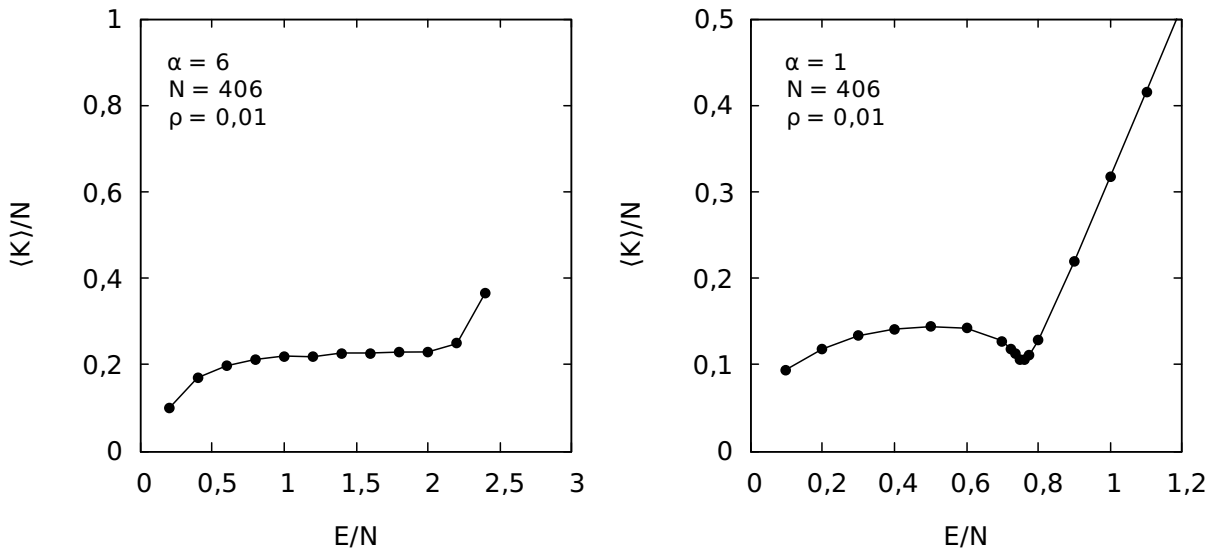


Figura 5.6: Curva calórica para: (a) curto alcance ($\alpha = 6$); (b) longo alcance ($\alpha = 1$).

Examinamos o efeito do tamanho do sistema sobre a curva calórica, aumentando o número de partículas N , e mantendo os demais parâmetros constantes. O resultado pode ser visto na figura 5.8. Observe no gráfico da esquerda que a região de calor específico negativo persiste para os diversos valores de N , no entanto ocorre um deslocamento do E_{crit} para a direita com o incremento de N . No gráfico da direita colapsamos as curvas escalando a energia por partículas com E/N^{1+x} , sendo $x = 0,0754$, e a energia cinética com $\langle K \rangle/N^{1+y}$, $y = 0,0858$. O valor de x foi obtido tomando-se a inclinação do ajuste do gráfico E_{crit} em função de N (gráfico interno em fig.5.8). De maneira análoga foi obtido y , utilizando-se o $\langle K \rangle/N$ máximo em função de N . Na referência [6] este colapso foi obtido com diferentes valores para x e y , $x = 0,0876$ e

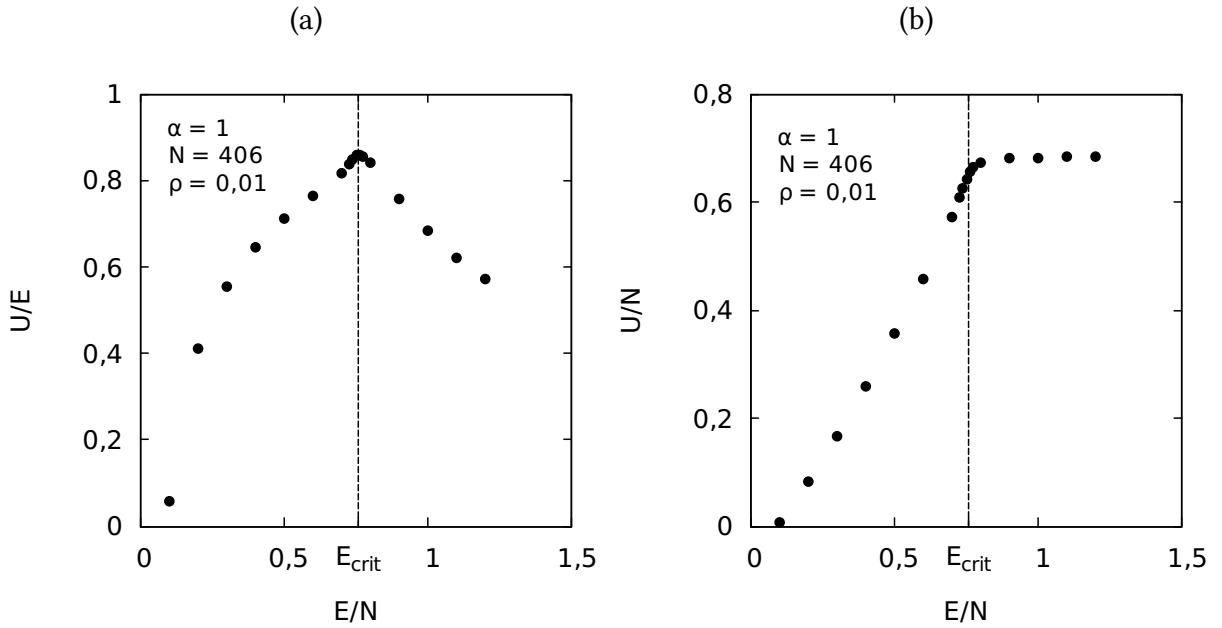


Figura 5.7: (a) Proporção entre energia potencial U e a energia total E em função E/N ; (b) Energia potencial em função da energia total.

$\gamma = 0,038$. Ainda em [6] levanta-se a hipótese do deslocamento do E_{crit} em função de N ser efeito de uma possível correção logarítmica escondida na escala de lei de potência introduzida por \tilde{N} ou efeito das condições de contorno. Mostra-se aqui, por meio da figura 5.9, que este incremento do E_{crit} é consequência de trabalharmos com a energia especificada E deslocada de menos U_0 . Na fig.5.9(a) estão representados E_{crit} e U_0 por círculos pretos e quadrados vermelhos, respectivamente. Como pode-se ver a energia crítica não deslocada, representada por triângulos verdes em fig.5.9(a), possui valor igual a $-0,038$ para qualquer N . A fig.5.9(b) ilustra as curvas calóricas com energia não deslocada.

O potencial ser de longo alcance não é condição suficiente para ocorrência de calor específico negativo, a figura 5.10 ilustra isto. Na fig.5.10 estão representadas as curvas calóricas para três densidades distintas, somente a curva de densidade mais baixa, $\rho = 0,01$, apresenta calor específico negativo. Os autores do artigo [22] mostraram para o caso bidimensional, como o analisado nesta dissertação, que para valores de α menores que um limite, o sistema exibe C negativo para determinadas densidades, como ilustramos através da figura 5.10. Por outro lado, no caso tridimensional, caso não estudado nesta dissertação, há sempre um valor da densidade para o qual o sistema exibe um C negativo, não importa qual seja o valor de α , em outras palavras, tanto o potencial de longo alcance quanto o de curto alcance podem apresentar calor específico negativo quando as partículas estão imersas em um espaço tridimensional.

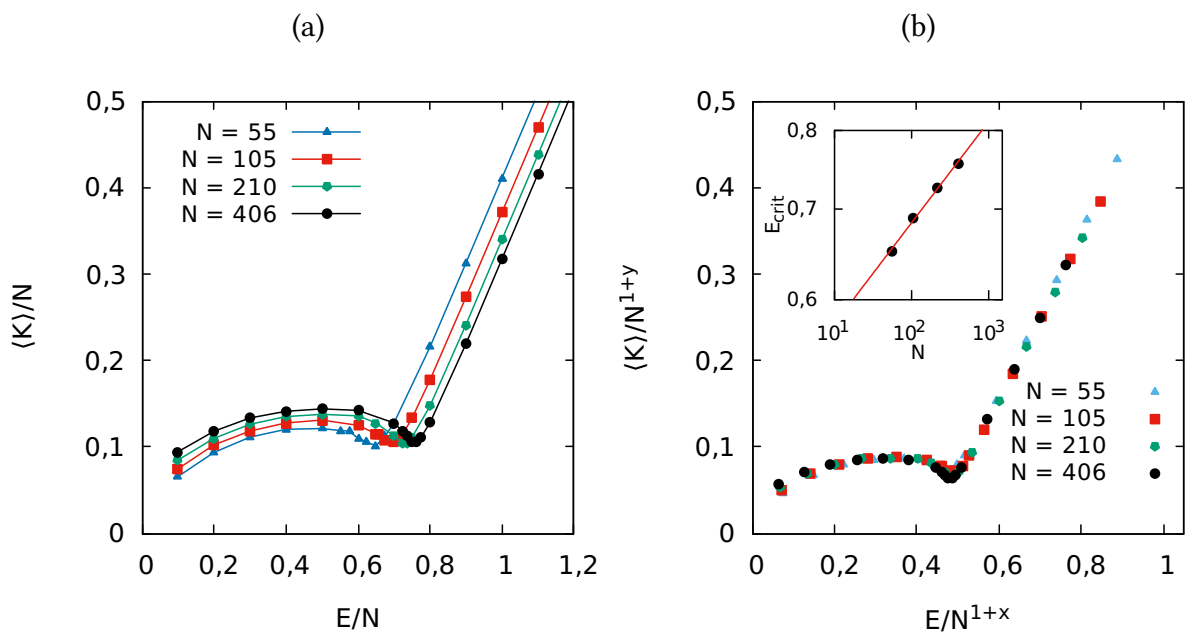


Figura 5.8: Relação da curva calórica com o número de partículas, para $\alpha = 1$ e $\rho = 0,01$. (a) Curva calórica para diferentes valores de N . (b) Curva colapsada, E/N escalando com $N^{0,0754}$ e $\langle k \rangle / N$ com $N^{0,0858}$. Gráfico interno: Energia crítica (E_{crit}) em função do número de partículas N (escala log-log).

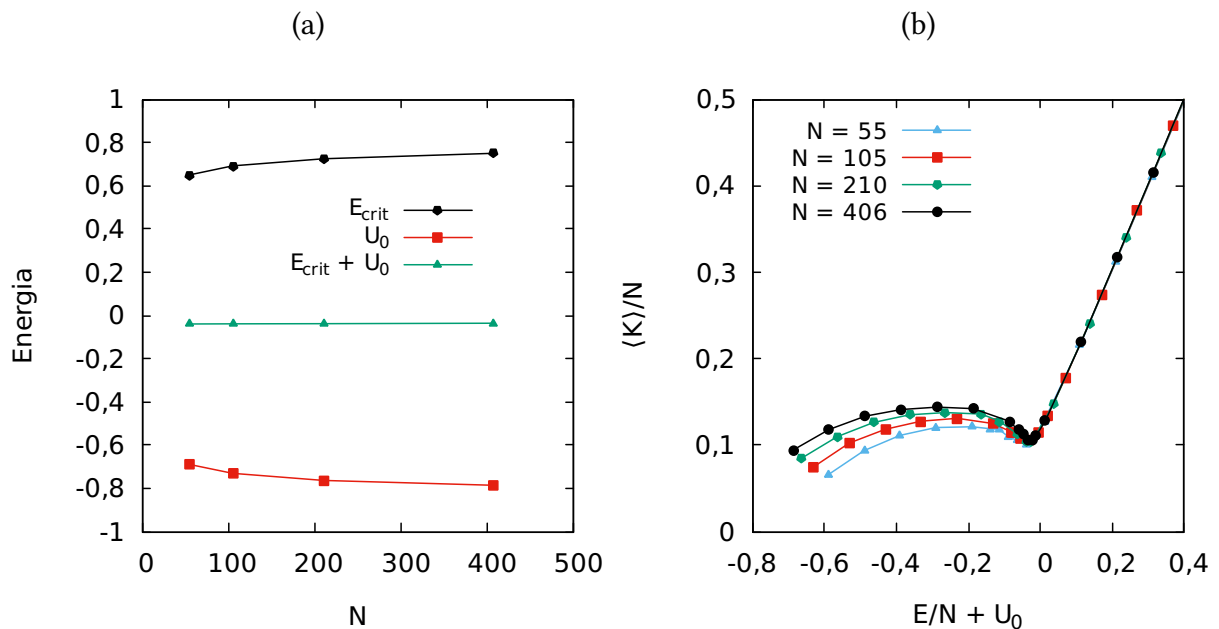


Figura 5.9: (a) Energia crítica (E_{crit}), círculos pretos, e energia potencial da configuração inicial (U_0), quadrados vermelhos, em função do número de partículas N . Os triângulos verdes representam a energia crítica não deslocada ($E_{\text{crit}} + U_0$), que é igual a $-0,038$ para qualquer N . (b) Curva calórica com energia não deslocada ($E/N + U_0$).

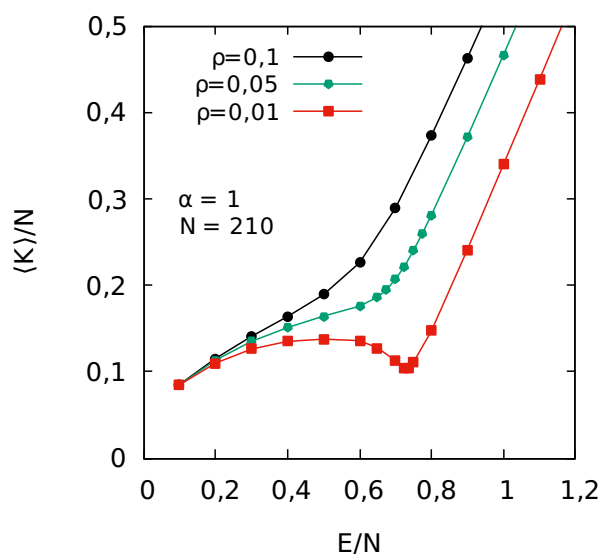


Figura 5.10: Curvas calóricas para diferentes densidades.

5.2.3 Expoente de Lyapunov

Nesta seção reproduzimos alguns resultados exibidos em [11] com respeito ao cálculo do expoente de Lyapunov. No sistema com potencial de interação tipo Lennard-Jones, condições iniciais que possuem uma mesma energia convergem para um mesmo expoente de Lyapunov λ , como mostrado na figura 5.11.(a). Afim de obter uma melhor representação do expoente de Lyapunov de uma dada energia, calculamos a média ($\langle \lambda \rangle$) sobre 10 amostras com diferentes condições iniciais para o momento p_i , mas mantendo-se constantes as demais variáveis e parâmetros, a figura 5.11 ilustra este procedimento. A razão de não termos realizado o mesmo procedimento, isto é, calculado a média do expoente de Lyapunov, ao estudarmos o sistema de Hénon-Heiles no capítulo 4, é que neste sistema para uma mesma energia pode-se obter valores bem distintos de λ quando tomadas diferentes condições iniciais (veja fig.4.4), assim se utilizássemos o valor médio das amostras, no sistema de Hénon-Heiles, perderíamos toda a riqueza de comportamento, como a exibida na fig.(4.8).

A figura 5.12 apresenta $\langle \lambda \rangle$ em função da energia por partícula para $\alpha = 6$ e $\alpha = 1$. Os gráficos de $\langle \lambda \rangle$, para $\alpha = 6$ e $\alpha = 1$, apresentam comportamento parecidos, exceto pela parte inicial que é crescente quando $\alpha = 6$ e decrescente quando $\alpha = 1$. Em ambos os casos, o comportamento é caótico, $\langle \lambda \rangle > 0$, para qualquer energia e $\langle \lambda \rangle$ possui um valor mínimo quando $E/N = E_{\text{crit}}$. Valores acima do E_{crit} levam a um crescimento linear do expoente de Lyapunov. Na faixa de energia analisada o potencial de curto alcance ($\alpha = 6$) apresenta comportamento mais caótico que o de longo alcance ($\alpha = 1$).

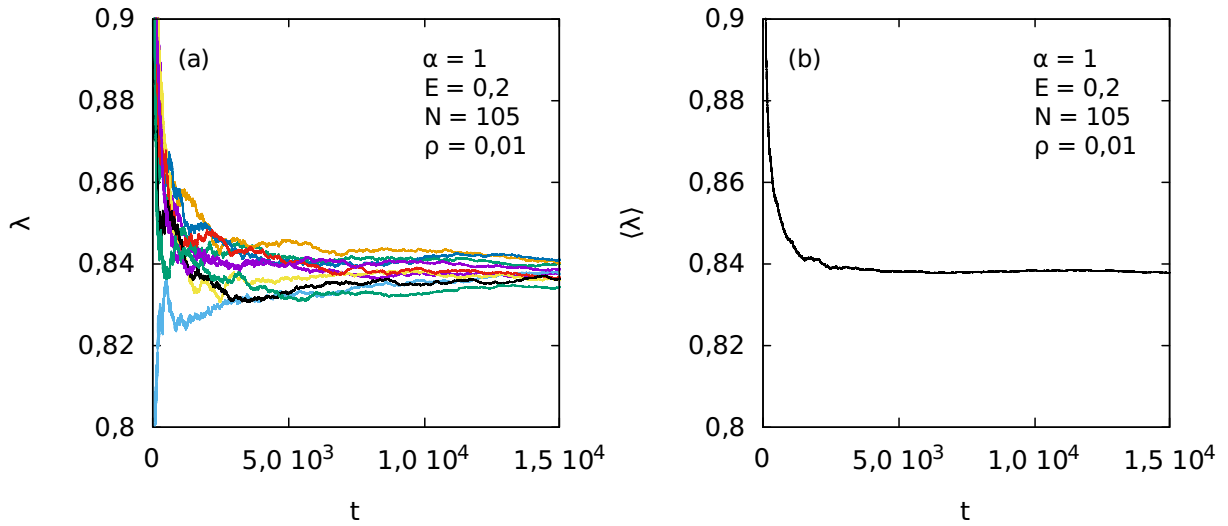


Figura 5.11: Expoente de Lyapunov em função do tempo, com $\alpha = 1$ e $E = 0.2$. (a) 10 realizações (cada realização está representada por uma cor) com diferentes condições iniciais dos momentos p_i . (b) Média das 10 realizações ilustrada em (a).

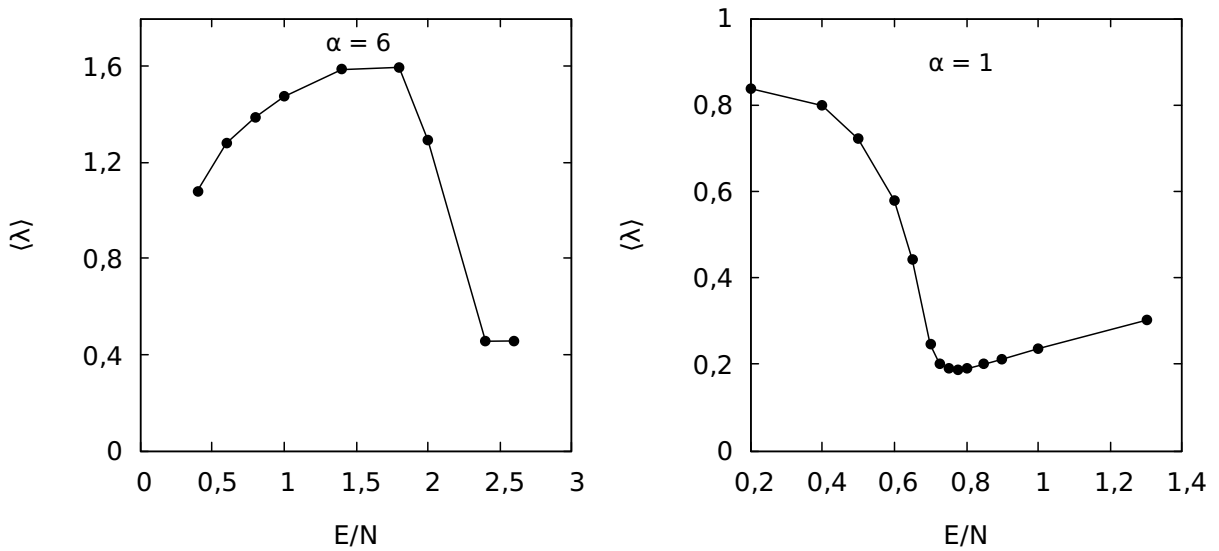


Figura 5.12: Expoente de Lyapunov ($\langle \lambda \rangle$) em função da Energia por partícula com $N = 105$, $\rho = 0,01$, para: (a) $\alpha = 6$; (b) $\alpha = 1$.

5.2.4 Distribuição do Momento Linear

Examinamos a distribuição densidade de probabilidade dos momentos lineares p_x . As figuras 5.13 e 5.14 exibem as distribuições de p_x no instante $t = 5 \times 10^3$, para $\alpha = 6$ e $\alpha = 1$ respectivamente, para diversas energias. A escolha dos valores da energia foram tomadas de modo a cobrir diferentes regiões das curvas calóricas representadas em fig.5.6. Tanto em fig.5.13 quanto em fig.5.14 os gráficos da esquerda são em escala linear-log e os da direita em quadrado-log. Como pode-se ver por estes gráficos, os dois casos analisados, $\alpha = 6$ e $\alpha = 1$, apresentam distribuições Gaussianas para todas as energias analisadas.

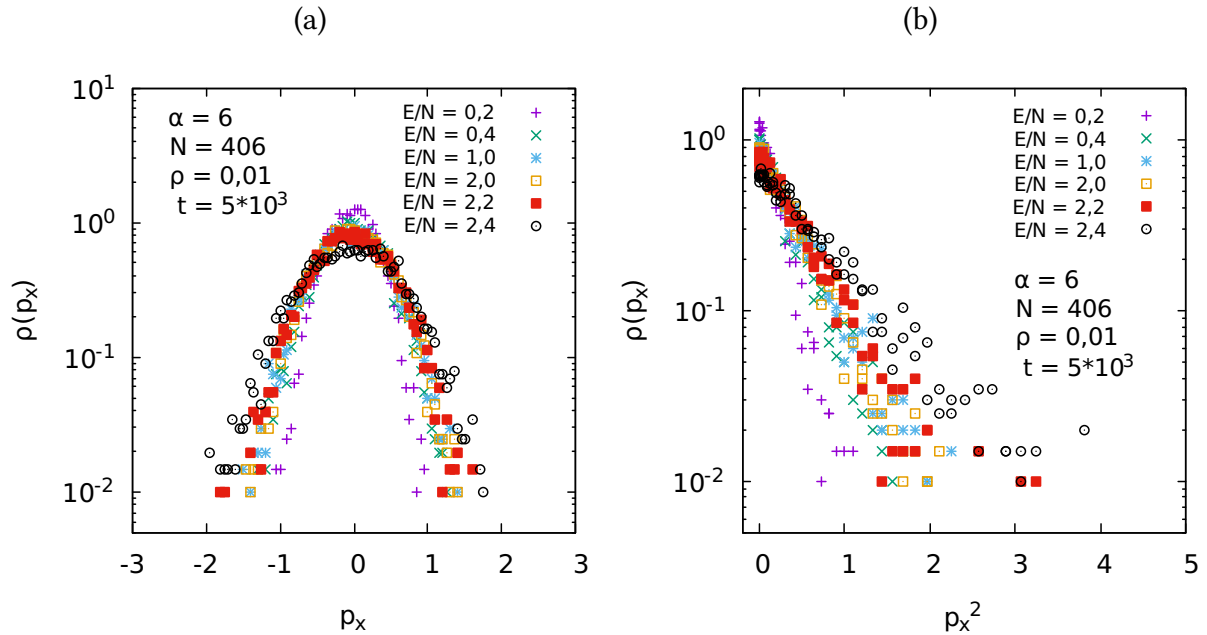


Figura 5.13: Distribuição do momento p_x no instante $t = 5 \times 10^4$, para uma interação de curto alcance ($\alpha = 6$). (a) Escala linear-log com p_x no eixo da abscissa, (b) com abscissa p_x^2 .

As figuras 5.15 e 5.16 ilustram distribuições obtidas por média de ensembles (fig. 5.15) e por média temporal (fig. 5.16) para o sistema com $\alpha = 1$ (longo alcance) e uma energia específica, $E = 0,7$. Em ambos os casos observamos distribuições que aparentam se aproximar de Gaussianas. Citamos dois resultados anteriores. Em [7], as curvas obtidas se aproximam de Gaussianas, tanto para curto alcance como para longo alcance, mas ali não foi possível concluir se são efetivamente Gaussianas, ou se existem desvios, mesmo que pequenos, por conta do número de partículas e tempos de simulação utilizados serem insuficientes. As distribuições foram obtidas por médias temporais e de ensemble, tomadas conjuntamente (misturadas) na região de equilíbrio termodinâmico. Em [11] foram feitos dois casos: exclusivamente uma média de ensembles, para um tempo fixo, e média temporal e de ensemble tomadas conjuntamente. Particularmente neste último caso, foram consideradas duas janelas temporais: uma delas imediatamente após o sistema ter alcançado a região de equilíbrio termodinâmico, e a outra janela tomada após algum tempo neste regime, o que permitiria algum tipo de termalização. As distribuições através de médias de ensembles aparentam ser Gaussianas, nos dois casos de curto e longo alcance. As demais distribuições, obtidas por médias misturadas, apresentam desvios da Gaussiana, possivelmente superiores às flutuações estatísticas. Isso ocorreu em ambos os casos de curto e longo alcance. O autor considera não ser possível obter conclusões mais fortes, por conta do pequeno número de realizações e janelas de tempo relativamente pequenas, — limitação semelhante à reportada em [7]. Nossos resultados se assemelham mais

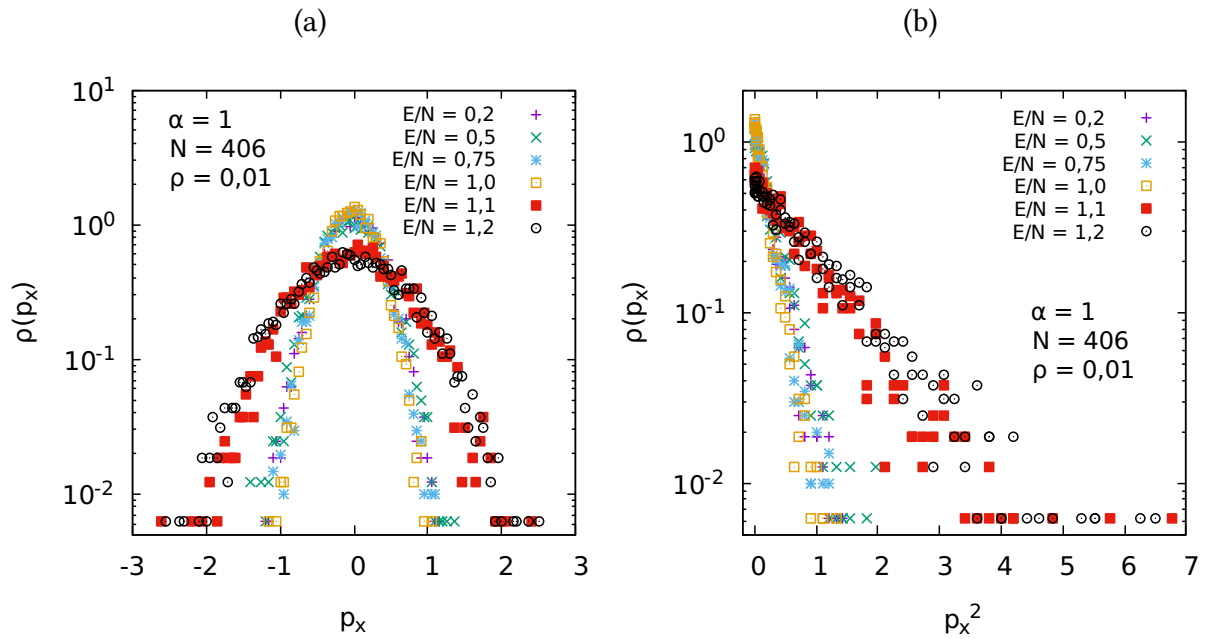


Figura 5.14: Distribuição do momento p_x no instante $t = 10^4$, para uma interação de longo alcance ($\alpha = 1$). (a) Escala linear-log com p_x no eixo da abscissa, (b) com abscissa p_x^2 .

àqueles obtidos em [7] do que os de [11]. Entretanto, não são idênticos. Diferenças podem ser em consequência da frequência de amostragem ao longo do tempo ou da largura da janela temporal. De qualquer modo, simulações para este sistema são custosas do ponto de vista computacional e os resultados obtidos ainda não são conclusivos.

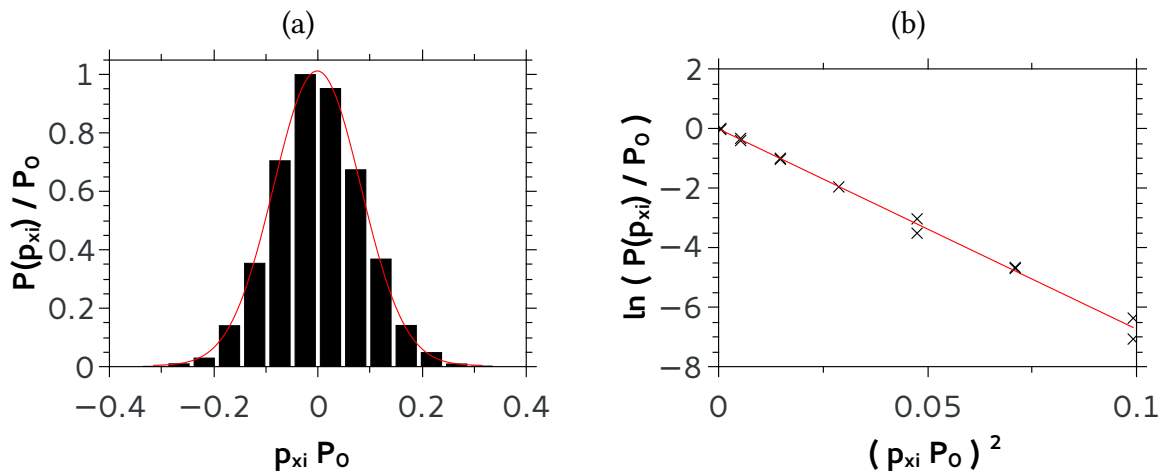


Figura 5.15: Distribuição do momento p_x , com $\alpha = 1$ e $E = 0,7$, no instante $t = 10^6$, obtida com média de 10 realizações. (a) Ajuste gaussiano. (b) Curva Linearizada. No gráfico linear alguns pontos da simulação estão sobrepostos devido a simetria da distribuição.

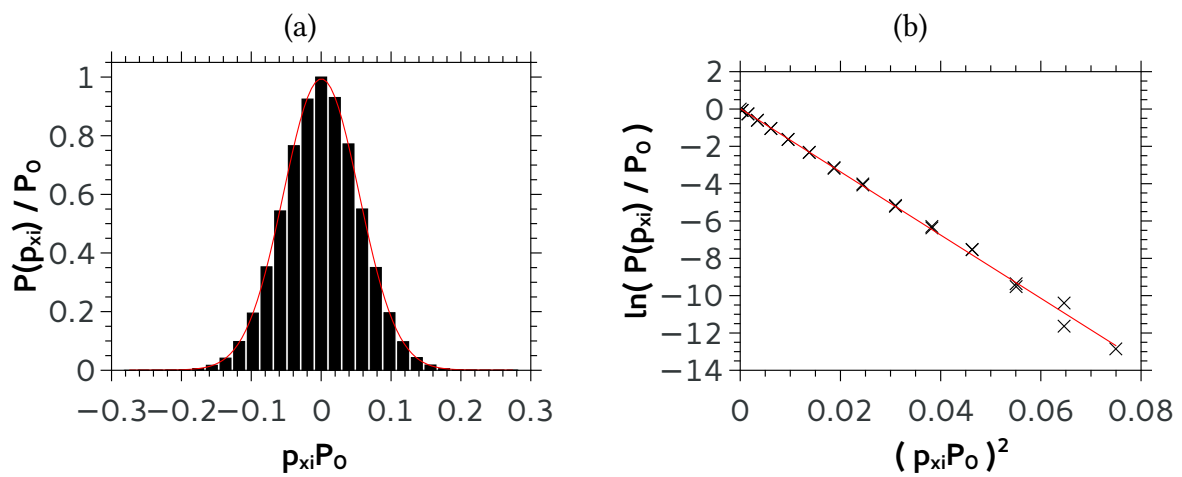


Figura 5.16: Distribuição temporal do momento p_x , com $\alpha = 1$ e $E = 0,7$. (a) Ajuste gaussiano. (b) Curva Linearizada. No gráfico linear alguns pontos da simulação estão sobrepostos devido a simetria da distribuição.

Capítulo 6

Conclusões

Nesta dissertação analisamos distribuições de probabilidade em dois sistemas Hamiltonianos: Hénon-Heiles e potencial tipo Lennard-Jones. Em sua estrutura geral, os três primeiros capítulos abordaram temas que servem de base para nosso estudo, e os dois capítulos seguintes desenvolveram o corpo principal desta dissertação.

No capítulo 1 discutimos brevemente sobre sistemas Hamiltonianos, e a importância de se usar integradores simpléticos ao se fazer a integração numérica dos mesmos, pois estes integradores possuem os principais atributos destes sistemas, conservação da energia e estrutura simplética. Apresentamos o integrador de Yoshida que foi utilizado em todas as simulações cujos resultados aparecem nesta dissertação.

No capítulo 2 apresentamos o conceito de caos determinístico e alguns métodos utilizados na caracterização de regimes caóticos (seção de Poincaré; expoente de Lyapunov (λ); Smaller Alignment index (SALI)). Mostramos como podemos reduzir o estudo de um fluxo a um mapa, por meio da seção de Poincaré. E descrevemos o método utilizado por Hénon que permite obter o ponto "exato" da seção desejada ao se integrar numericamente. A respeito das técnicas que se utilizam diretamente do conceito de sensibilidade às condições iniciais, trabalhamos com o expoente de Lyapunov (λ) e o Smaller Alignment index (SALI). Descrevemos também o método da contagem de caixas para o cálculo da dimensão fractal. Fizemos uso de todas estas técnicas no estudo do sistema de Hénon-Heiles (capítulo 4), e o cálculo do expoente de Lyapunov é utilizado no capítulo 5.

No capítulo 3, dedicado à Mecânica Estatística não Extensiva, apresentamos a entropia de Tsallis (S_q) e a família de distribuições que surgem ao otimizá-la, chamadas de q -Gaussianas. Além disso, tratamos do problema da não extensividade dos sistemas com potenciais do tipo $V \propto 1/r^\alpha$ ($\alpha/d > 1$ correspondem a interações de curto alcance; $\alpha/d < 1$ correspondem a interações de longo alcance). Mostramos que é possível recuperar a extensividade destes sistemas, por meio do escalonamento utilizando o fator \tilde{N} . Este fator de escala foi empregado ao definir-se o potencial do tipo Lennard-Jones 5.1.

No capítulo 4 examinamos o potencial de Hénon-Heiles. Mostramos que este potencial possui 4 pontos de equilíbrio, sendo 3 deles pontos de escape do poço de potencial. Estes pontos de escape possuem energia $E = 1/6$. Analisamos a dinâmica das órbitas por meio da seção de Poincaré e do expoente de Lyapunov. Encontramos que, para baixas energias, $E \leq 1/12$, o espaço de fase acessível para o sistema de Hénon-Heiles é completamente povoado por órbitas quase-periódicas ($\lambda = 0$). Ao aumentarmos a energia, emergem regiões caóticas ($\lambda > 0$) que coexistem com regiões de expoente de Lyapunov nulo. Este comportamento ocorre para faixas de energia entre $1/12 < E \leq 1/6$. A fração da região caótica em relação à área total do espaço de fases cresce com o aumento da energia, até atingir seu máximo com $E = 1/6$,

que é a energia de escape do poço de potencial. A energia $E = 1/6$ ainda apresenta regiões quase-periódicas, portanto, o sistema de Hénon-Heiles não possui valor de energia que leve a uma ocupação total do espaço de fase acessível, por órbitas caóticas.

Os resultados citados anteriormente são bem conhecidos da literatura. O conteúdo original da dissertação foi mostrar que regiões com $\lambda > 0$ possui distribuições Gaussianas na região central, enquanto as caudas são não gaussianas. Ao tomarmos regiões ocupadas unicamente por órbitas com $\lambda = 0$, distribuições q -Gaussianas aparentam se ajustar às curvas, desde que se utilize uma granulação baixa nos histogramas (*bins* largos, vide figura 4.14). Quando avaliados com mais pontos, o que permite uma granulação mais fina, surgem novos padrões, vide parte central da figura 4.16 d. Esta figura 4.16 foi avaliada no caso de mistura de condições iniciais, $\lambda \approx 0$ e $\lambda > 0$, diferente da figura 4.14, construída com todas as condições iniciais tendo $\lambda \approx 0$. Pensamos que o comportamento anômalo, emergente no centro da distribuição, também esteja presente caso esta figura fosse avaliada exclusivamente com condições iniciais com $\lambda \approx 0$; assim a comparação seria mais precisa. Entretanto percebemos que a q -Gaussiana descreve o comportamento geral em uma primeira aproximação. Verificamos também que o caso de mistura de condições iniciais é descrito, em primeira aproximação, pela combinação linear de uma distribuição Gaussiana e uma q -Gaussiana, equação (4.26), quadro similar ao obtido com outros mapas conservativos [39], [31], [30].

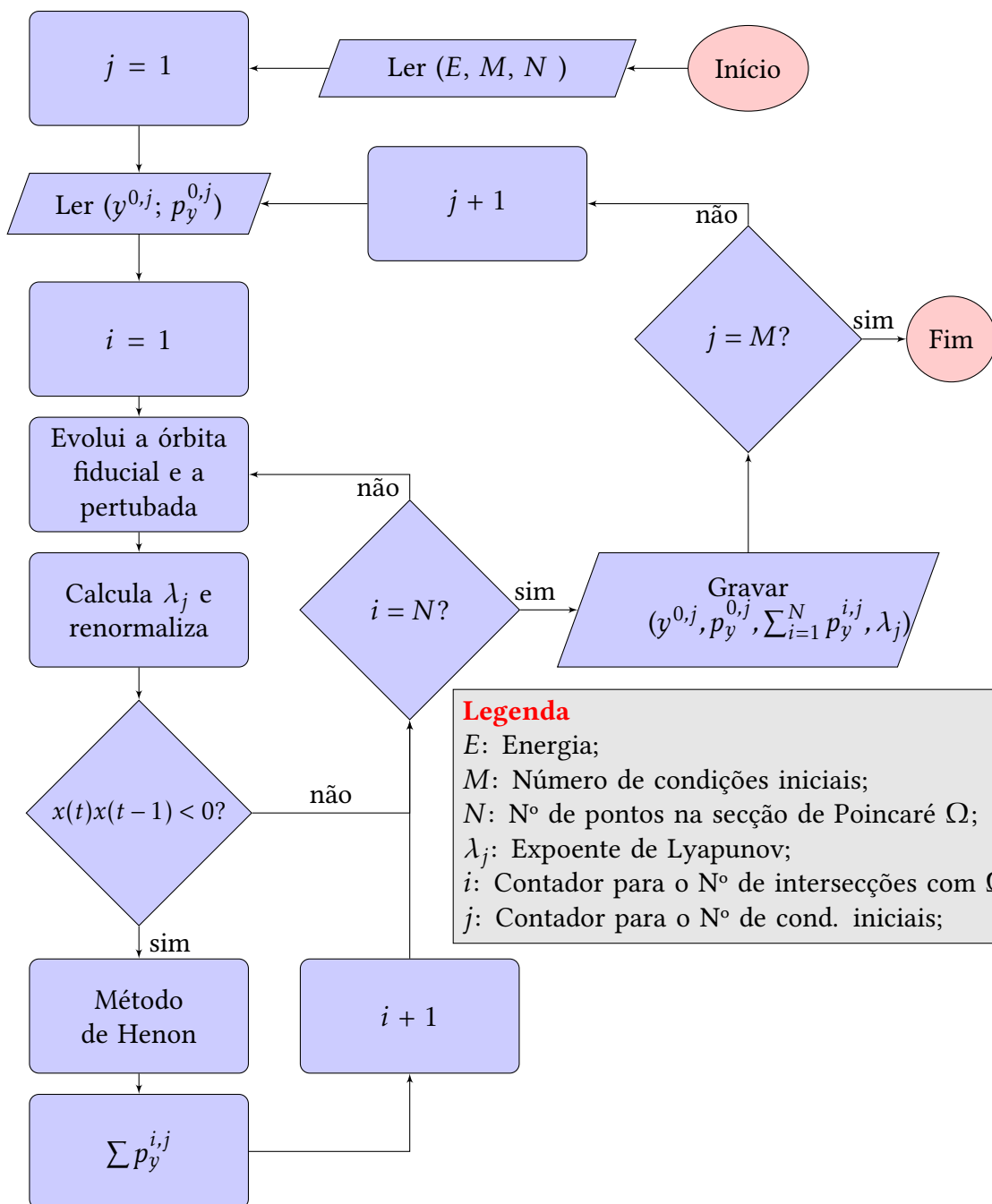
Também exibimos, na figura 4.12, uma representação análoga ao diagrama de bifurcação, na qual é possível se visualizar o tipo de órbita e período que um ponto do espaço de fases gera em função da energia.

Os estudos realizados nesta dissertação são preliminares. Estudos mais sistemáticos das distribuições δ_{p_y} são necessários, para avaliar outros valores de energia, e os efeitos de (i) manter-se o tempo convencional t_F fixo versus manter o tempo natural N fixo; (ii) considerar-se ambos os sentidos $p_x > 0$ e $p_x < 0$ ou apenas um deles (o ascendente), nas secções de Poincaré; (iii) fazer-se um refinamento mais detalhado da classificação das regiões do espaço de fases: neste trabalho, as regiões do espaço de fases foram separadas em duas categorias, as quase-periódicas ($\lambda < \lambda_-$) e as caóticas ($\lambda > \lambda_+$); a referência [50] identifica diversos outros tipos de órbitas.

No capítulo 5, estudamos um sistema Hamiltoniano constituído de N partículas confinadas em uma caixa quadrada de lado L , com potencial de interação entre partículas do tipo Lennard-Jones. Como condições iniciais, utilizamos o sistema em uma configuração triangular, com a distância entre as partículas aquela que minimiza o potencial entre pares. Os momentos foram distribuídos uniformemente em uma faixa compatível com a energia total (conhecida na literatura como distribuição *water bag*). Consideramos como temperatura a energia cinética média por partícula. Fizemos média de ensembles e média temporal. Na evolução temporal para a energia cinética média, após um transiente inicial, a temperatura estabiliza em torno de seu valor estacionário, que é dependente da energia total do sistema. Esse valor estacionário é utilizado para a construção das curvas calóricas. Para sistemas com interações de curto alcance ($\alpha/d > 1$), estas curvas são bem comportadas, no sentido que são sempre crescentes, isto é, possuem calor específico positivo para qualquer faixa de energia. Para o potencial de longo alcance $\alpha = 1$, foi observado calor específico negativo em uma faixa específica de energia. Este fenômeno se mantém ao aumentarmos o número de partículas N . Mostramos que o deslocamento da cúspide, relatado em [6], é consequência do deslocamento da energia tomada como referência (adotamos a energia potencial da disposição inicial das partículas, U_0 , como sendo nula). Este efeito se extingue para densidades mais altas, por exemplo, $\rho = 10^{-1}$.

Apêndice A

Algoritmo Hénon-Heiles



Apêndice B

Unidades reduzidas

Existem várias razões para se trabalhar com unidades reduzidas, ou adimensionais, em vez de unidades físicas. Uma delas é que pode-se prevenir o risco de underflow e overflow durante a simulação numérica, pois evita-se utilizar valores absolutos muito próximos de 0 ou muito maiores que 1, típicos da escala atômica e astronômica quando utilizado o sistema internacional de unidades (SI). Porém o principal motivo para o uso das unidades reduzidas, como argumentado por Frenkel [16] e Rapaport [28], está relacionado a noção de escalonamento, pois um único modelo pode descrever toda uma classe de problemas, e uma vez realizadas as medidas das propriedades em unidades reduzidas, elas podem facilmente ser escaladas para as unidades físicas do problema particular.

Para o sistema tipo Lennard-Jones pode-se tomar como unidades básicas:

- σ como **unidade de comprimento**, de modo que a relação entre unidade reduzida (r_{ij}^*) e física (r_{ij}) fica:

$$r_{ij}^* = \frac{r_{ij}}{\sigma}, \quad (\text{B.1})$$

- ϵ para **unidade de energia**, assim:

$$E^* = \frac{E}{\epsilon}, \quad (\text{B.2})$$

- m como **unidade de massa**, logo:

$$m_i^* = \frac{m_i}{m}, \quad (\text{B.3})$$

as demais unidades são obtidas a partir destas. Por exemplo, a unidade de tempo pode ser deduzida da relação:

$$F = -\nabla v(r_{ij}), \quad (\text{B.4})$$

se considerarmos o potencial com simetria radial, podemos escrever,

$$F = -\frac{dv(r_{ij})}{dr}, \quad (\text{B.5})$$

$$ma = -\frac{dv(r_{ij})}{dr}, \quad (\text{B.6})$$

$$m \frac{d^2r}{dt^2} = -\frac{dv(r_{ij})}{dr}, \quad (\text{B.7})$$

ao realizar a análise dimensional, obtemos:

$$[m] \frac{[r]}{[t^2]} = \frac{[E]}{[r]}, \quad (\text{B.8})$$

$$[t] = \sqrt{\frac{[m][r^2]}{[E]}}, \quad (\text{B.9})$$

$$(\text{B.10})$$

logo, a unidade de medida do tempo, escrita em termos das unidades de comprimento (σ), energia(ϵ) e massa (m) é:

$$[t] = \sqrt{\frac{m\sigma^2}{\epsilon}}, \quad (\text{B.11})$$

portanto, em unidade reduzida:

$$t^* = \frac{t}{\sqrt{\frac{m\sigma^2}{\epsilon}}}, \quad (\text{B.12})$$

$$t^* = t \sqrt{\frac{\epsilon}{m\sigma^2}}. \quad (\text{B.13})$$

As outras unidades, listadas na tabela abaixo, são obtidas de forma análoga.

densidade	$\rho^* = \rho\sigma^3$
temperatura	$T^* = k_b T/\epsilon$
energia	$E^* = E/\epsilon$
pressão	$P^* = P\sigma^3/\epsilon$
tempo	$t^* = (\epsilon/m\sigma^2)^{1/2}t$
força	$f^* = f\sigma/\epsilon$
torque	$\tau^* = \tau/\sigma$
tensão superficial	$\gamma^* = \gamma\sigma^2/\epsilon$

Referências Bibliográficas

- [1] Sumiyoshi Abe, N. V. Sarlis, E. S. Skordas, H. K. Tanaka, and P. A. Varotsos. Origin of the usefulness of the natural-time representation of complex time series. *Phys. Rev. Lett.*, 94:170601, May 2005.
- [2] Jacobo Aguirre, Juan C. Vallejo, and Miguel A. F. Sanjuán. Wada basins and chaotic invariant sets in the hénon-heiles system. *Phys. Rev. E*, 64:066208, Nov 2001.
- [3] C. Beck and F. Schlögl. *Thermodynamics of chaotic systems*. Cambridge University Press, Cambridge, 1995, 1995.
- [4] Giancarlo Benettin, Luigi Galgani, Antonio Giorgilli, and Jean-Marie Strelcyn. Lyapunov characteristic exponents for smooth dynamical systems and for hamiltonian systems; a method for computing all of them. part 1: Theory. *Meccanica*, 15(1):9–20, Mar 1980.
- [5] Giancarlo Benettin, Luigi Galgani, Antonio Giorgilli, and Jean-Marie Strelcyn. Lyapunov characteristic exponents for smooth dynamical systems and for hamiltonian systems; a method for computing all of them. part 2: Numerical application. *Meccanica*, 15(1):21–30, Mar 1980.
- [6] Ernesto P Borges and Constantino Tsallis. Negative specific heat in a lennard-jones-like gas with long-range interactions. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 305(1):148 – 151, 2002. Non Extensive Thermodynamics and Physical applications.
- [7] Ernesto Pinheiro Borges. Manifestações dinâmicas e termodinâmicas de sistemas não-extensivos. Master’s thesis, Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, 2004.
- [8] A.M.C. de Souza R. Maynard C. Tsallis, S.V.F. Levy. Statistical-mechanical foundation of the ubiquity of lévy distributions in nature. *Phys. Rev. Lett.*, 75:3589–3593, 1995.
- [9] A.M.C. de Souza R. Maynard C. Tsallis, S.V.F. Levy. Erratum: Statistical-mechanical foundation of the ubiquity of lévy distributions in nature. *Phys. Rev. Lett.*, 77:5442, 1996.
- [10] H.B. Callen. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. Wiley, 1985.
- [11] Alejandro Fernández Canosa. Estudio y análisis numérico de sistemas hamiltonianos. Master’s thesis, UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRI, June 2016.
- [12] Leonardo J.L. Cirto, Vladimir R.V. Assis, and Constantino Tsallis. Influence of the interaction range on the thermostatics of a classical many-body system. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 393:286 – 296, 2014.
- [13] E M F Curado and C Tsallis. Generalized statistical mechanics: connection with thermodynamics. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 24(2):L69, 1991.

- [14] C. Tsallis D. Prato. Nonextensive foundation of lévy distributions. *Phys. Rev. E*, 60:2398–2401, 1999.
- [15] M. D’Agostino, F. Gulminelli, Ph. Chomaz, M. Bruno, F. Cannata, R. Bougault, F. Gramagna, I. Iori, N. Le Neindre, G.V. Margagliotti, A. Moroni, and G. Vannini. Negative heat capacity in the critical region of nuclear fragmentation: an experimental evidence of the liquid-gas phase transition. *Physics Letters B*, 473(3):219 – 225, 2000.
- [16] Daan Frenkel and Berend Smit. *Understanding Molecular Simulation*. Academic Press, Inc., Orlando, FL, USA, 2nd edition, 2001.
- [17] James Gleick. *Chaos: Making a New Science*. Penguin Books, New York, NY, USA, 1987.
- [18] Mie Gustav. Zur kinetischen theorie der einatomigen körper. *Annalen der Physik*, 316(8):657–697, 1903.
- [19] Jan Havrda and František Charvát. Quantification method of classification processes. concept of structural α -entropy. *Kybernetika*, 3(1):30–35, 1967.
- [20] M. Henon. On the numerical computation of poincaré maps. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 5(2):412 – 414, 1982.
- [21] C. Henon, M. & Heiles. The applicability of the third integral of motion: Some numerical experiments. *Astronomical Journal*, 69(4), 1964.
- [22] M.J Ison, A Chernomoretz, and C.O Dorso. Caloric curves in two- and three-dimensional lennard–jones-like systems including long-range forces. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 341:389 – 400, 2004.
- [23] J. E. Jones. On the determination of molecular fields. —ii. from the equation of state of a gas. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 106(738):463–477, 1924.
- [24] P. Jund, S. G. Kim, and C. Tsallis. Crossover from extensive to nonextensive behavior driven by long-range interactions. *Phys. Rev. B*, 52:50–53, Jul 1995.
- [25] D. Lynden-Bell. Negative specific heat in astronomy, physics and chemistry. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 263(1):293 – 304, 1999. Proceedings of the 20th IUPAP International Conference on Statistical Physics.
- [26] Benoit B Mandelbrot. *The fractal geometry of nature*. Freeman, San Francisco, CA, 1982.
- [27] E. Ott. *Chaos in Dynamical Systems*. Cambridge University Press, 1993.
- [28] D. C. Rapaport. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge University Press, 2 edition, 2004.
- [29] A. Renyi. *Probability Theory*. Dover Books on Mathematics. Dover Publications, 2007.
- [30] Guiomar Ruiz, Ugur Tirnakli, Ernesto P. Borges, and Constantino Tsallis. Statistical characterization of discrete conservative systems: The web map. *Phys. Rev. E*, 96:042158, Oct 2017.

- [31] Guiomar Ruiz, Ugur Tirnakli, Ernesto P Borges, and Constantino Tsallis. Statistical characterization of the standard map. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2017(6):063403, 2017.
- [32] Alfréd Rényi. On measures of entropy and information. In *Proceedings of the Fourth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability, Volume 1: Contributions to the Theory of Statistics*, pages 547–561, Berkeley, Calif., 1961. University of California Press.
- [33] N. V. Sarlis, E. S. Skordas, and P. A. Varotsos. Nonextensivity and natural time: The case of seismicity. *Phys. Rev. E*, 82:021110, Aug 2010.
- [34] Martin Schmidt, Robert Kusche, Thomas Hippler, Jörn Donges, Werner Kronmüller, Bernd von Issendorff, and Hellmut Haberland. Negative heat capacity for a cluster of 147 sodium atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 86:1191–1194, Feb 2001.
- [35] Ch Skokos. Alignment indices: a new, simple method for determining the ordered or chaotic nature of orbits. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 34(47):10029, 2001.
- [36] Ch Skokos, Ch Antonopoulos, T C Bountis, and M N Vrahatis. Detecting order and chaos in hamiltonian systems by the sali method. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 37(24):6269, 2004.
- [37] S. H. Strogatz. *Nonlinear Dynamics and Chaos*. Studies in Nonlinearity. Perseus Books, 1994.
- [38] W. Thirring. Systems with negative specific heat. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and nuclei*, 235(4):339–352, Aug 1970.
- [39] Ugur Tirnakli and Ernesto P. Borges. The standard map: From Boltzmann-Gibbs statistics to tsallis statistics. *Scientific Reports*, 6:23644, 2016.
- [40] C. Tsallis. *Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics: Approaching a Complex World*. Springer New York, 2009.
- [41] Constantino Tsallis. Possible generalization of boltzmann-gibbs statistics. *Journal of Statistical Physics*, 52(1):479–487, Jul 1988.
- [42] Constantino Tsallis. What are the numbers that experiments provide. *Quimica Nova*, 17(6):468–471, 1994.
- [43] Constantino Tsallis. Nonextensive statistics: theoretical, experimental and computational evidences and connections. *Brazilian Journal of Physics*, 29:1 – 35, 03 1999.
- [44] Constantino Tsallis, Renio S. Mendes, and A.R. Plastino. The role of constraints within generalized nonextensive statistics. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 261(3):534 – 554, 1998.
- [45] P. A. Varotsos, N. V. Sarlis, and E. S. Skordas. Long-range correlations in the electric signals that precede rupture. *Phys. Rev. E*, 66:011902, Jul 2002.
- [46] P. A. Varotsos, N. V. Sarlis, H. K. Tanaka, and E. S. Skordas. Some properties of the entropy in the natural time. *Phys. Rev. E*, 71:032102, Mar 2005.

- [47] Panayiotis Varotsos, Nicholas Sarlis, and Efthimios Skordas. Spatio-temporal complexity aspects on the interrelation between seismic electric signals and seismicity. *76:294–321*, 01 2001.
- [48] Haruo Yoshida. Construction of higher order symplectic integrators. *Physics Letters A*, 150(5):262 – 268, 1990.
- [49] Haruo Yoshida. Recent progress in the theory and application of symplectic integrators. *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, 56(1):27–43, Mar 1993.
- [50] Euaggelos E. Zotos. Classifying orbits in the classical h enon–heiles hamiltonian system. *Nonlinear Dynamics*, 79(3):1665–1677, Feb 2015.