

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

**Estados de equilíbrio e não-equilíbrio em dois sistemas  
com interações de longo alcance: HMF e gHMF\***

Fernanda Pereira da Cruz Benetti

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

Porto Alegre  
Dezembro de 2012

---

\* Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)



 *À Dolores*



# Agradecimentos

Expresso minha gratidão a algumas das pessoas que me ajudaram, direta e indiretamente, com o trabalho de pesquisa e a elaboração desta dissertação, principalmente aos meus orientadores Yan Levin e Renato Pakter, assim como ao meu colega Tarcísio Teles, por toda sua ajuda; às minhas amigas Bárbara Sbeghen, Beatriz Mizusaki e Bibiana Farenzena; e ao meu namorado Everton Agnes.

Reservo um agradecimento especial à minha família: aos meus pais, Antonio e Silvia Benetti, por sua dedicação à educação das suas filhas; à minha irmã Lucia, que durante toda minha vida me inspirou com seu entusiasmo pela cultura, seja ela científica ou artística; e à minha avó Lalá, por todo seu carinho.



# Resumo

Sistemas compostos por partículas que interagem por meio de forças de longo alcance, como sistemas gravitacionais ou coulombianos, apresentam comportamentos distintos daqueles cujas forças são de curto alcance. No equilíbrio termodinâmico pode haver inequivalência entre ensembles, resultante da falta das propriedades de extensividade e aditividade. Porém, antes mesmo de atingir o equilíbrio, esses sistemas relaxam para estados estacionários cujas distribuições não são necessariamente de Maxwell-Boltzmann, em um processo evolutivo regido pela equação de Vlasov, ou equação de Boltzmann não-colisional. A relaxação colisional para o equilíbrio ocorre somente após um tempo que diverge com o aumento do tamanho do sistema. Nesse trabalho, estudamos dois modelos cujas interações são de longo alcance: o modelo *Hamiltonian Mean-Field*, ou HMF, e o modelo HMF generalizado, ou gHMF. Nos dois casos, comparamos os resultados da mecânica estatística de equilíbrio no ensemble microcanônico e os estados estacionários de não-equilíbrio. Propomos teorias fundamentadas na dinâmica de Vlasov para descrever os estados estacionários, e corroboramos nossas previsões através da simulação computacional da dinâmica de  $N$  corpos.



# Abstract

Systems composed of particles that interact by means of long-range forces, such as gravitational or Coulomb systems, present behaviors that differ from those with short-range forces. In thermodynamic equilibrium ensembles may be inequivalent due to their lack of extensivity and additivity. However, even before reaching equilibrium, such systems become trapped in out-of-equilibrium stationary states characterized by distributions that are not necessarily Maxwell-Boltzmann, through a process which is governed by the Vlasov, or non-collisional Boltzmann, equation. The collisional relaxation that leads to equilibrium only occurs afterwards, after a period of time that diverges as the system size increases. In the present work, we study two models with long-range interactions: the Hamiltonian Mean Field (HMF) and the generalized Hamiltonian Mean-Field (gHMF) models. For both cases, we compare the results of equilibrium statistical mechanics in the microcanonical ensemble with the out-of-equilibrium stationary states. We propose theories based on Vlasov dynamics in order to describe these non-equilibrium states, and corroborate our results with numerical simulations of the  $N$ -body dynamics.



# Sumário

<b>1. Introdução</b> . . . . .	1
<b>2. Modelo HMF</b> . . . . .	5
2.1 O modelo . . . . .	5
2.2 Mecânica Estatística de Equilíbrio . . . . .	7
2.3 Não-Equilíbrio: Estado Estacionário . . . . .	14
2.3.1 Dinâmica Molecular . . . . .	14
2.3.2 Limite termodinâmico e dinâmica de Vlasov . . . . .	18
2.3.3 Teoria de Lynden-Bell . . . . .	20
2.3.4 Equação de envelope . . . . .	22
2.3.5 Partículas teste . . . . .	25
2.3.6 Ressonâncias paramétricas e quebra de ergodicidade . . . . .	26
2.3.7 Distribuição núcleo-halo . . . . .	28
2.3.8 Relaxação para o equilíbrio . . . . .	31
<b>3. Modelo gHMF</b> . . . . .	35
3.1 O modelo . . . . .	35
3.2 Mecânica Estatística de Equilíbrio . . . . .	36
3.3 Estados de não-equilíbrio . . . . .	40
3.3.1 Dinâmica molecular . . . . .	40
3.3.2 Estabilidade do estado homogêneo . . . . .	41
<b>4. Conclusões</b> . . . . .	47
<b>Referências Bibliográficas</b> . . . . .	51



## Capítulo 1

# Introdução

Entre os diversos fenômenos estudados pela mecânica estatística, uma quantidade significativa envolve sistemas de muitos corpos cujos componentes interagem por meio de forças de longo alcance. Tais forças são oriundas de potenciais do tipo  $U(r) \sim 1/r^\alpha$ , com  $\alpha < d$  e  $d$  sendo a dimensão do sistema. Como exemplo, temos o potencial gravitacional e o coulombiano. Quando seu alcance não é blindado, como na blindagem de Debye em plasmas neutros, é fundamental levar em consideração a natureza de longo alcance da interação. Para encontrar a configuração de equilíbrio de sistemas de muitas partículas, é natural usarmos a termodinâmica e mecânica estatística tradicionais. No entanto, ao aplicá-las a sistemas com interações de longo alcance, deparamo-nos com algumas dificuldades.

A termodinâmica depende das propriedades de extensividade e de aditividade do sistema estudado [1], nenhuma das quais é obedecida por sistemas de longo alcance [2]. Um sistema de energia  $U(N)$ , onde  $N$  é o número de partículas, é extensivo se, ao multiplicarmos  $N$  por uma constante  $\lambda$ , a nova energia será  $\lambda U(N)$ . No entanto, se cada partícula interagir com todas as outras, o potencial escalará com  $N^2$ , e a energia não será extensiva. Essa propriedade pode ser adquirida através de um escalonamento do potencial com o inverso do número de partículas, um processo conhecido como prescrição de Kac [3]. O escalonamento, porém, não resolve o problema da não-aditividade. Em sistemas de curto alcance, como a energia de interface é desprezível frente à energia do *bulk* — escalam com  $N^{2/3}$  e  $N$ , respectivamente — o sistema inteiro pode ser considerado como um conjunto de subsistemas isolados. Entretanto, com o alcance maior da interação entre as partículas, essa consideração perde a validade, pois o conceito de interface já não é bem definido. A falta de aditividade leva à possibilidade de calor específico negativo no ensemble microcanônico, pois é justamente a aditividade que garante a concavidade da entropia. Por sua vez, a existência do calor específico negativo não é possível no ensemble canônico.

Dessa forma, interações de longo alcance podem levar a uma violação da equivalência de ensembles, um conceito fundamental da mecânica estatística tradicional [4, 5].

Outra questão crucial para o tratamento estatístico de sistemas de longo alcance é sua ergodicidade. A hipótese de Boltzmann da equiprobabilidade dos microestados requer que o sistema seja ergódico. Seja um espaço de fase de  $2dN$  dimensões, onde  $N$  é o número de partículas e  $d$  é a dimensão do sistema; cada ponto nesse espaço representa uma possível configuração (microestado) do sistema. Um sistema, inicialmente em um ponto, deve evoluir ao longo de uma superfície de energia constante nesse espaço de fase de acordo com as leis de Hamilton. Em vez de considerar um único sistema evoluindo ao longo de toda a superfície, pode-se pensar em infinitos sistemas distribuídos ao longo dela. O ensemble microcanônico é esse conjunto, ou seja, sistemas em todos os possíveis microestados correspondentes a dadas variáveis macroscópicas, de mesma energia. No entanto, se não houver ergodicidade — se houver regiões da superfície de energia constante que são inacessíveis para o sistema a partir de uma determinada condição inicial — essa correspondência entre a evolução temporal de um único sistema e uma distribuição de infinitos sistemas não é mais válida. Para sistemas de curto alcance, a ergodicidade geralmente é observada, embora não haja uma prova formal de sua existência. Para sistemas de longo alcance, há indícios de quebra da ergodicidade [6, 7].

De fato, a relaxação de um sistema com interações de longo alcance é diferente da relaxação para o equilíbrio de um sistema com interações de curto alcance. No segundo caso, a relaxação é colisional, com a função distribuição de uma partícula  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  regida pela equação de Boltzmann  $Df/Dt = (\partial f/\partial t)_{\text{col}}$ , onde  $Df/Dt \equiv \partial f/\partial t + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + (\mathbf{F}/m) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f$  é a derivada convectiva de  $f$  e  $\mathbf{F} = \dot{\mathbf{p}}$ . No primeiro caso, a dependência do termo colisional da equação de Boltzmann com as correlações entre partículas, que escala com  $1/N$  [2] devido à prescrição de Kac descrita anteriormente, resulta que, no limite termodinâmico  $N \rightarrow \infty$ , as correlações tornam-se totalmente desprezíveis. A evolução de  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  passa a ser descrita de forma exata pela equação de Vlasov [8], ou equação de Boltzmann não-colisional,  $Df/Dt = 0$ . Enquanto a solução estacionária para a equação de Boltzmann é a distribuição de Maxwell-Boltzmann, a equação de Vlasov possui infinitas soluções estacionárias. Na dinâmica de Vlasov, a partir de uma condição inicial, a função  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  evolui infinitamente, filamentando-se em escalas de comprimento cada vez menores. Eventualmente, essa escala será tão pequena que a evolução microscópica de  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  não seria mais observável em uma resolução finita (a resolução acessível para experimentos ou simulações

numéricas). É nessa escala macroscópica que  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  atinge um estado estacionário. Sistemas com interações de longo alcance, sob a dinâmica de Vlasov, relaxam rapidamente para esses estados estacionários, que são soluções da equação de Vlasov [9, 10]. Para  $N$  finito, as correlações entre partículas contribuem para a dinâmica e eventualmente relaxam o sistema para o equilíbrio termodinâmico, de forma análoga à relaxação colisional de sistemas de curto alcance. Isso só ocorre após um tempo que escala com  $N^\gamma$ , onde  $\gamma$  depende do tipo de interação [11]. A relaxação de sistemas de longo alcance, portanto, ocorre em duas etapas: a primeira, não-colisional, que leva a uma solução estacionária de Vlasov, e a segunda, colisional<sup>1</sup>, em uma ordem de tempo muito maior que a primeira [2]. É importante ressaltar que tomando o limite  $N \rightarrow \infty$  antes do limite  $t \rightarrow \infty$ , essa segunda relaxação nunca ocorre, pois não há mais correlações entre partículas.

Resolver a equação de Vlasov para uma condição inicial arbitrária não é trivial. No entanto, a dinâmica de Vlasov é essencial para descrever os estados quasi-estacionários<sup>2</sup> nos quais sistemas de longo alcance permanecem antes de relaxar para o equilíbrio. Por isso, há uma demanda de teorias baseadas na dinâmica de Vlasov, capazes de prever e descrever os estados quasi-estacionários sem resolver explicitamente a equação de Vlasov nem simular a dinâmica molecular completa de  $N$  corpos. Algumas já existem, como a teoria de relaxação violenta de Lynden-Bell [12] que será descrita na seção 2.3.3; porém, ainda não há um consenso sobre sua validade, e ainda não existe uma teoria geral que sirva para qualquer condição inicial.

Uma motivação para o desenvolvimento de uma teoria geral de longo alcance é a aplicação em sistemas reais. Em muitos sistemas astrofísicos, por exemplo, o tempo de vida dos estados quasi-estacionários é maior que a idade do universo, e a natureza de longo alcance das interações é determinante na dinâmica de galáxias, aglomerados globulares e halos de matéria escura [13]. Em relação ao potencial coulombiano, existem os casos de plasmas não-neutros, magneticamente confinados [14, 15]. Além disso, há exemplos na hidrodinâmica [16] e na física atômica [17].

Uma teoria proposta por Levin et al. para plasmas não-neutros [14], baseada na dinâmica de Vlasov e em ressonâncias paramétricas, também foi aplicada com sucesso a outros sistemas, como gravitação em uma e duas dimensões [18, 11] e a um modelo XY de campo médio com energia cinética, conhecido pelo nome *Hamiltonian mean field model*,

---

<sup>1</sup> Apesar da relaxação ser devida a correlações e não a colisões, a denominação "colisional" é usada em analogia à relaxação de sistemas de interações de curto alcance.

<sup>2</sup> Também abreviadas como qSS, de *quasi-stationary states*

ou modelo HMF [19, 20]. A teoria propõe que, quando há oscilações coletivas no sistema, partículas ressonantes podem ganhar energia às custas das oscilações, formando um halo difuso de alta energia ao redor de um núcleo denso de baixa energia. Nesse caso, quando as oscilações são amortecidas, o sistema é preso na configuração núcleo-halo, tornando-o não-ergódico. Estudamos esse efeito no modelo HMF, e desenvolvemos uma teoria que determina para quais condições essa formação ocorrerá ou não, e conseqüentemente para quais condições há quebra de ergodicidade [7]. Também estudamos um modelo HMF generalizado (gHMF), com interações nemáticas, que tem um diagrama de fase mais propício para comparar transições de fase de equilíbrio e de não-equilíbrio, devido a um parâmetro a mais em relação ao modelo HMF.

Os próximos dois capítulos descrevem o trabalho realizado sobre esses dois modelos. No capítulo 2, início apresentando a solução de equilíbrio no ensemble microcanônico do modelo HMF. Em seguida, descrevo os resultados de simulação numérica da dinâmica molecular do modelo, que mostram os estados quasi-estacionários, e exponho a teoria analítica usada para descrevê-los. O capítulo 3 trata do modelo HMF generalizado. Novamente, apresento a solução de equilíbrio e comparo com o diagrama de fase da dinâmica molecular, além da teoria analítica que descreve as transições de fase nos qSS. No final, o capítulo 4 resume os conceitos e resultados apresentados em toda a dissertação.

## Capítulo 2

# Modelo HMF

No presente capítulo, será apresentado o modelo HMF (*Hamiltonian mean field model*). Ele é um modelo XY tipo campo médio, no qual todos os componentes interagem entre si. Apresentado por Antoni e Ruffo em 1995 (ver ref. [20]), ele passou a ser um modelo paradigmático para o estudo de características gerais de sistemas com interações de longo alcance. O capítulo é dividido em três seções, em que são descritos (1) o modelo, (2) a solução de equilíbrio no ensemble microcanônico e (3) os estados estacionários fora de equilíbrio. .

## 2.1 O modelo

O modelo HMF é um sistema de  $N$  partículas, descrito pelo hamiltoniano

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

onde  $\theta_i$  é a coordenada posição e  $p_i$  o momentum conjugado da  $i$ -ésima partícula, e  $\gamma$  é uma constante referente à intensidade da interação. O sistema pode ser interpretado como um conjunto de spins  $XY$  sobre uma rede, onde  $\theta_i$  seria a orientação do spin, ou como partículas confinadas em um anel de raio unitário, onde  $\theta_i$  seria a posição sobre o anel. O sinal de  $\gamma$  determina o sentido de acoplamento entre as partículas: se  $\gamma > 0$ , a interação é atrativa e o acoplamento é ferromagnético; se  $\gamma < 0$ , a interação é repulsiva e o acoplamento é antiferromagnético.

O hamiltoniano (2.1) é uma simplificação de sistemas gravitacionais ou Coulombianos em uma dimensão, com condições de contorno periódicas. Seja um sistema formado por  $N$  partículas distribuídas sobre um anel de raio unitário, ou seja, com posição  $x \in [-\pi, \pi)$ .

A equação de Poisson é

$$\nabla^2 \psi(x) = \xi \sum_{i=1}^N \left[ \delta(x - x_i) - \frac{1}{2\pi} \right] \quad (2.2)$$

onde  $\xi$  depende do sistema em consideração. No caso gravitacional,  $\xi = 4\pi Gm$ , onde  $G$  é a constante gravitacional,  $m = M/N$  é a densidade de massa e  $M$  a massa total. Para o caso Coulombiano,  $\xi = -q/\varepsilon_0$ , onde  $q = Q/N$  é a densidade de carga,  $Q$  a carga total e  $\varepsilon_0$  é a permissividade do vácuo. O termo  $1/2\pi$  é necessário para manter a neutralidade de carga do sistema total, devido às condições de contorno periódicas.

Expressando a delta de Dirac na representação de Fourier,  $\delta(x - x_i) = \sum_n \exp[i n(x - x_i)]/2\pi$  e integrando a equação, o potencial tem a forma

$$\psi(x) = \xi \sum_{i=1}^N \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \frac{1 - \cos(n(x - x_i))}{n^2} \right]. \quad (2.3)$$

A constante  $\xi$  foi somada para que o potencial seja nulo quando  $x = x_i, \forall x_i$ . Truncando a série em  $n = 1$ , temos o potencial do modelo HMF.

Nesse trabalho, consideramos o modelo HMF de interação ferromagnética e normalizada de forma que  $\gamma = 1$ . Voltando ao hamiltoniano dado pela equação (2.1), reescrevemos  $\cos(\theta_i - \theta_j)$ ,

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^N (1 - \cos \theta_i \cos \theta_j - \text{sen } \theta_i \text{sen } \theta_j) \quad (2.4)$$

ou ainda

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2} - \frac{1}{2N} \left( \sum_{i=1}^N \cos \theta_i \right)^2 - \frac{1}{2N} \left( \sum_{i=1}^N \text{sen } \theta_i \right)^2. \quad (2.5)$$

O parâmetro de ordem do sistema é a magnetização por partícula,  $\mathbf{M} = (M_x, M_y)$ , e suas componentes são definidas como

$$M_x = \langle \cos \theta \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \cos \theta_i \quad (2.6)$$

e

$$M_y = \langle \text{sen } \theta \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \text{sen } \theta_i. \quad (2.7)$$

Podemos reconhecer esse parâmetro nos somatórios de (2.5) e então escrever a energia média por partícula,  $\varepsilon = H/N$ , como

$$\varepsilon = \frac{\langle p^2 \rangle}{2} + \frac{1 - M_x^2 - M_y^2}{2}. \quad (2.8)$$

Outra quantidade utilizada no trabalho é a energia individual de cada partícula,

$$\epsilon(\theta_i, p_i) = \frac{p_i^2}{2} + 1 - M_x \cos(\theta_i) - M_y \sin(\theta_i). \quad (2.9)$$

Por simetria, sempre podemos escolher uma distribuição inicial de partículas tal que  $M_y = 0$ , pois  $\sin \theta = -\sin(-\theta)$ . No restante do trabalho, consideraremos esse termo como nulo.

## 2.2 Mecânica Estatística de Equilíbrio

O estado de equilíbrio do HMF pode ser resolvido exatamente usando a mecânica estatística clássica. Essa seção é uma revisão da solução de equilíbrio apresentada na referência [2]. Não há inequivalência entre ensembles para o HMF [2], portanto analisaremos apenas o caso microcanônico.

O ensemble microcanônico é definido pela superfície de energia  $E$  constante no espaço de estados  $2Nd$ -dimensional, sendo  $d$  o número de graus de liberdade de cada partícula ( $d = 1$  para o HMF),

$$\Omega(E, N) = \int_{-\pi}^{\pi} d\boldsymbol{\theta} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \delta(H(\mathbf{p}, \boldsymbol{\theta}) - E), \quad (2.10)$$

onde  $\boldsymbol{\theta}$  e  $\mathbf{p}$  são vetores  $N$ -dimensionais que representam as posições e velocidades de todas as  $N$  partículas do sistema:  $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N)$  e  $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \dots, p_N)$ . Dessa forma, também temos que  $d\boldsymbol{\theta} = \prod_{i=1}^N d\theta_i$  e  $d\mathbf{p} = \prod_{i=1}^N dp_i$ .

Procedemos ao cálculo da entropia,  $S = \ln \Omega$ . Definimos  $K$  como a energia cinética da energia total  $E$ , e  $U(\boldsymbol{\theta})$  como o termo potencial do hamiltoniano  $H(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{p})$ , ou seja

$$U(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^N (1 - \cos \theta_i \cos \theta_j). \quad (2.11)$$

Dessa forma, o argumento da delta de Dirac da equação (2.10) será nulo quando  $K = \sum_i^N p_i^2/2 = |\mathbf{p}|^2/2$  e  $E - K = U(\boldsymbol{\theta})$ . A integral da equação (2.10) pode ser expressa em dois termos, um cinético e um potencial (ou configuracional, pois depende da configuração dos componentes de  $\boldsymbol{\theta}$ ). Para tanto, precisamos também integrar sobre os possíveis valores de  $K$ , para que todas as possíveis combinações de energia cinética e energia potencial da energia total  $E$  sejam incluídas. A equação (2.10) para a superfície de energia constante

$E$  é escrita como

$$\begin{aligned}\Omega(E, N) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \int dK \delta\left(K - \frac{|\mathbf{p}|^2}{2}\right) \int_{-\pi}^{\pi} d\boldsymbol{\theta} \delta(E - K - U(\boldsymbol{\theta})) \\ &= \int dK \Omega_{kin}(K) \Omega_{conf}(E - K),\end{aligned}\quad (2.12)$$

onde

$$\Omega_{kin}(K) = \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \delta\left(K - \frac{|\mathbf{p}|^2}{2}\right), \quad (2.13)$$

$$\Omega_{conf}(E - K) = \int_{-\pi}^{\pi} d\boldsymbol{\theta} \delta(E - K - U(\boldsymbol{\theta})). \quad (2.14)$$

No termo cinético, equação (2.13), o argumento da delta de Dirac é nulo quando o módulo quadrado de  $\mathbf{p}$  é igual à  $2K$ , ou seja, é a equação para uma esfera  $N$ -dimensional. Como a integral depende apenas do módulo quadrado de  $\mathbf{p}$ , podemos usar a simetria esférica para realizar a integração. Em coordenadas esféricas em três dimensões, uma integral para uma função  $f(r^2)$  teria a forma  $\int 4\pi r^2 f(r^2) dr = \int S_3(r) f(r^2) dr$ , onde  $S_3(r)$  é a área da superfície de uma esfera de raio  $r$ . Isso pode ser generalizado para  $N$  dimensões:  $\int d\mathbf{r} f(r^2) = \int S_N(r) f(r^2) dr$ , onde

$$S_N(r) = \frac{2\pi^{N/2}}{\Gamma(\frac{N}{2})} r^{N-1} \quad (2.15)$$

é a área da superfície de uma esfera  $N$ -dimensional. Então, escrevendo  $p = |\mathbf{p}|$  e  $f(r^2) = \delta(K - p^2/2)$ , temos

$$\Omega_{kin}(K) = \int_0^{\infty} dp \frac{2\pi^{N/2}}{\Gamma(\frac{N}{2})} p^{N-1} \delta\left(K - \frac{p^2}{2}\right). \quad (2.16)$$

Usando as propriedades da delta de Dirac

$$\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{a}$$

e

$$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{|f'(x_i)|},$$

onde  $x_i$  é a  $i$ -ésima raiz de  $f(x)$ , finalmente temos

$$\begin{aligned}\Omega_{kin}(K) &= \frac{2\pi^{N/2}}{\Gamma(\frac{N}{2})} \frac{1}{\sqrt{2K}} \int_0^{\infty} dp p^{N-1} \delta\left(p - \sqrt{2K}\right) \\ &= \frac{2\pi^{N/2}}{\Gamma(\frac{N}{2})} (2K)^{N/2-1}.\end{aligned}\quad (2.17)$$

Voltando à equação (2.12), trocamos de variável,  $N\kappa = K$ , e assim  $Nd\kappa$ . Reescrevemos a equação (2.12) como

$$\begin{aligned}\Omega(N,\varepsilon) &= \int d\kappa \frac{(2\pi N)^{N/2}}{\Gamma(\frac{N}{2})} (\kappa)^{N/2-1} \Omega_{conf}[N(\varepsilon - \kappa)] \\ &= \int d\kappa \exp \left\{ N \left[ \frac{1}{2} \ln 2\pi + \frac{1}{2} \ln N + \frac{1}{2} \ln(\kappa) - \frac{1}{N} \ln \Gamma \left( \frac{N}{2} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{1}{N} \ln \Omega_{conf}(N(\varepsilon - \kappa)) \right] \right\}.\end{aligned}\quad (2.18)$$

A entropia específica do sistema é  $s(\varepsilon) = S/N = \lim_{N \rightarrow \infty} \Omega(N,\varepsilon)/N$ . No limite termodinâmico, a aproximação de  $\Gamma(z)$  para  $\text{Re } z \rightarrow \infty$ , dada por

$$\ln \Gamma(z) \approx \left( z - \frac{1}{2} \right) \ln z - z + \frac{1}{2} \ln(2\pi), \quad (2.19)$$

é válida [2], e substituímos  $\lim_{N \rightarrow \infty} \ln \Gamma(N/2) \approx (N/2 - 1/2) \ln(N/2) - N/2 + (1/2) \ln 2\pi$ . Nesse limite também podemos usar o método de ponto de sela para resolver a integral e encontrar a entropia. A base desse método consiste em expandir o argumento da exponencial,  $Nf(\kappa)$ , em torno de seu ponto máximo, pois como  $N$  é muito grande, a maior contribuição à integral será da extremidade de  $f(\kappa)$ . Denotando o valor de  $\kappa$  que maximiza  $f(\kappa)$  como  $\kappa^*$ , o resultado até segunda ordem tem a forma

$$\begin{aligned}s(\varepsilon) &= \frac{1}{N} \ln \left\{ \exp[Nf(\kappa^*)] \int d\kappa \exp \left[ \frac{N}{2} f''(\kappa^*) (\kappa - \kappa^*)^2 \right] \right\} \\ &= f(\kappa^*) + \frac{1}{N} \ln \sqrt{\frac{2\pi}{N|f''(\kappa^*)|}},\end{aligned}\quad (2.20)$$

onde

$$f(\kappa) = (\ln 2\pi + \ln 2 + \ln \kappa + 1)/2 + (\ln N/2 - \ln 2\pi)/2N + s_{conf}(\varepsilon - \kappa) \quad (2.21)$$

e

$$s_{conf} = \frac{1}{N} \ln \Omega_{conf}.$$

O segundo termo da equação (2.20) é desprezível frente ao primeiro por ser da ordem de  $1/N$ , assim como o segundo termo de  $f(\kappa)$  (equação (2.21)). Dessa maneira, encontramos uma expressão geral para a entropia,

$$s(\varepsilon) = \frac{1}{2} \ln 2\pi + \frac{1}{2} \ln 2 + \frac{1}{2} + \sup_{\kappa} \left[ \frac{1}{2} \ln \kappa + s_{conf}(\varepsilon - \kappa) \right]. \quad (2.22)$$

Resta especificar a forma da contribuição configuracional,  $s_{conf}$ . Esse termo depende de  $\varepsilon - \kappa = u$ , a energia potencial média por partícula. Conforme a equação (2.8),  $u$  é uma função de  $M$ , a magnetização por partícula; por isso, o subespaço  $\Omega_{conf}(Nu)$  deve ser proporcional ao subespaço  $\Omega_{mag}$ , dado por

$$\begin{aligned}\Omega_{mag}(M) &= \int_{-\pi}^{\pi} \prod_{i=1}^N d\theta_i \delta\left(\sum_{i=1}^N \cos \theta_i - NM\right) \delta\left(\sum_{i=1}^N \sin \theta_i\right) \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} da \int_{-\infty}^{\infty} db \int_{-\pi}^{\pi} \prod_{i=1}^N d\theta_i \exp\left[ia\left(\sum_{i=1}^N \cos \theta_i - NM\right) + ib\left(\sum_{i=1}^N \sin \theta_i\right)\right] \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} da \int_{-\infty}^{\infty} db \exp(-iaNM) \left[\int_{-\pi}^{\pi} d\theta \exp(ia \cos \theta + ib \sin \theta)\right]^N.\end{aligned}\quad (2.23)$$

Definindo

$$g(a,b) = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \exp(ia \cos \theta + ib \sin \theta), \quad (2.24)$$

podemos escrever a equação (2.23) como

$$\Omega_{mag}(M) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} da \int_{-\infty}^{\infty} db \exp[N(-iaM + \ln g(a,b))] \quad (2.25)$$

e usar o método de ponto de sela novamente. Assim como na equação (2.20), expandimos o expoente até segunda ordem em torno de seu ponto extremo. Definindo  $\lambda = -iaM + \ln g(a,b)$ , a integral será dada por

$$\begin{aligned}\Omega_{mag}(M) &= \frac{1}{4\pi^2} \exp[N\lambda(a^*,b^*)] \int_{-\infty}^{\infty} da \int_{-\infty}^{\infty} db \exp\left\{\frac{1}{2}\left[(a-a^*)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial a^2}\Big|_{a^*,b^*}\right.\right. \\ &\quad \left.\left.+ 2(a-a^*)(b-b^*) \frac{\partial^2 f}{\partial a \partial b}\Big|_{a^*,b^*} + (b-b^*)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial b^2}\Big|_{a^*,b^*}\right]\right\}.\end{aligned}\quad (2.26)$$

Nossa intenção é usar essa integral para determinar a entropia configuracional  $s_{conf} \sim \ln \Omega_{mag}/N$ . As integrais envolvendo derivadas segundas resultarão em um fator de ordem  $1/N$ , que pode ser colocado em um termo separado ao tomarmos o logaritmo, e, portanto, desprezado. Por isso, interessamo-nos apenas em  $\Omega_{mag}(M) \sim \exp[N\lambda(a^*,b^*)]$ . As derivadas primeiras são nulas, pois se trata de uma extremidade, e levam às equações

$$\frac{1}{g(a,b)} \frac{\partial g(a,b)}{\partial a} = iaM \quad (2.27)$$

e

$$\frac{1}{g(a,b)} \frac{\partial g(a,b)}{\partial b} = 0, \quad (2.28)$$

que são satisfeitas por  $b^* = 0$  e

$$\frac{I_1(a^*)}{I_0(a^*)} = M, \quad (2.29)$$

onde  $a^* = ia$  e  $I_n(z) = \int d\theta \cos n\theta \exp(z \cos \theta)$  é a função de Bessel modificada de primeira espécie. Substituindo no expoente, temos que

$$\Omega_{\text{mag}}(M) \sim \exp(-NM a^*(M) + N \ln I_0(a^*)) \quad (2.30)$$

onde  $a^*$  satisfaz a equação (2.29). Conforme foi comentado anteriormente, os outros termos que apareceriam na expressão (2.30) são inversamente proporcionais à  $N$  e podemos desprezá-los. Além disso,  $\Omega_{\text{mag}}$  e  $\Omega_{\text{conf}}$  diferem apenas por uma constante de proporcionalidade, que pode ser ignorada na expressão da entropia, então podemos usar a equação (2.30) em  $s_{\text{conf}}$ . Agora resta apenas a maximização na equação (2.22). Ela pode ser feita em relação à  $M$  em vez de  $\kappa$ , pois  $\kappa = \varepsilon - u = \varepsilon - (1 - M^2)/2$ , e assim temos

$$s(\varepsilon) = \frac{1}{2}(\ln 4\pi + 1) + \sup_M \left[ \frac{1}{2} \ln \left( \varepsilon - \frac{1 - M^2}{2} \right) - M a^*(M) + \ln I_0(a^*(M)) \right]. \quad (2.31)$$

A solução da maximização é

$$M = a^*(M)(2\varepsilon - 1 + M^2). \quad (2.32)$$

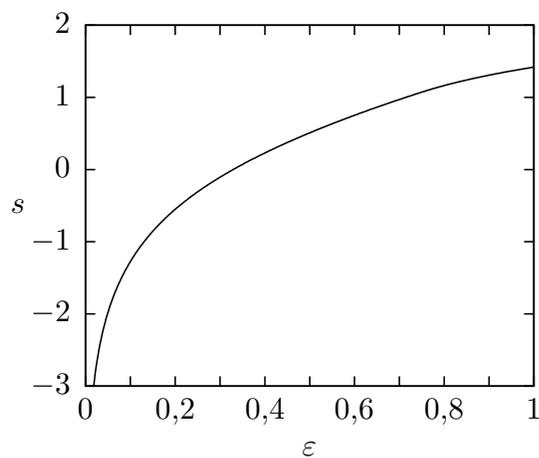
As equações (2.32) e (2.29) determinam a magnetização de equilíbrio em função da energia. Chegamos na expressão final da entropia em função da energia, dada por

$$s(\varepsilon) = \frac{1}{2}(\ln 4\pi + 1) + \sup_M \left[ \frac{1}{2} \ln \left( \varepsilon - \frac{1 - M^2}{2} \right) - \frac{M^2}{2\varepsilon - 1 + M^2} + \ln I_0 \left( \frac{M}{2\varepsilon - 1 + M^2} \right) \right]. \quad (2.33)$$

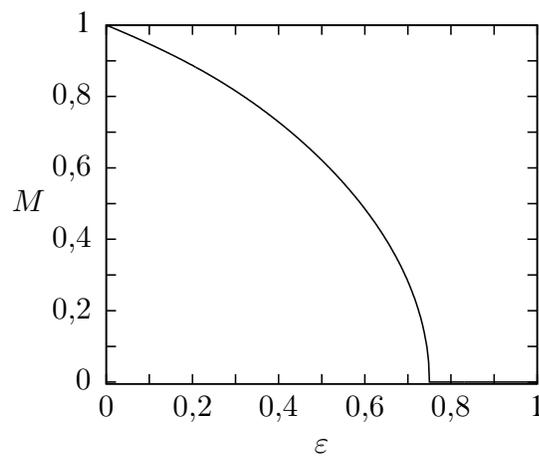
A curva  $s(\varepsilon)$  está exibida na figura 2.1.

A figura 2.2 mostra a magnetização de equilíbrio, dada pela solução das equações (2.29) e (2.32), em função da energia  $\varepsilon$ . Em  $\varepsilon = 0$ , o estado de equilíbrio do modelo HMF é totalmente magnetizado, com  $M = 1$ . A medida que  $\varepsilon$  aumenta, a magnetização decresce continuamente, até atingir  $M = 0$  na energia crítica  $\varepsilon_c = 0,75$ .

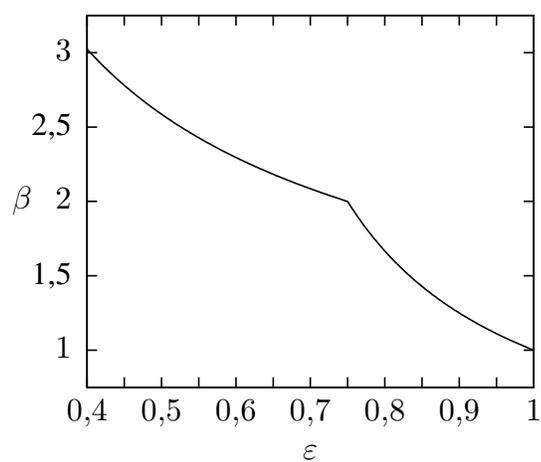
A diminuição contínua da magnetização indica uma transição de segunda ordem, o que é confirmado ao plotarmos a temperatura termodinâmica  $\beta = 1/k_B T = \langle p^2 \rangle$  em função da energia. A curva de  $\beta(\varepsilon)$  apresenta uma descontinuidade em sua derivada  $\partial\beta/\partial\varepsilon \sim \partial^2 s/\partial\varepsilon^2$  em  $\varepsilon = 0,75$ , a energia crítica.



**Fig. 2.1:** Entropia em função da energia.



**Fig. 2.2:** Magnetização de equilíbrio  $M$  em função da energia  $\varepsilon$  (solução da equação (2.32)).



**Fig. 2.3:** A temperatura inversa  $\beta = 1/(2\varepsilon - 1 + M^2)$  em função da energia. A descontinuidade da derivada em  $\varepsilon = 0,75$  indica uma transição de segunda ordem.

## 2.3 Não-Equilíbrio: Estado Estacionário

Os resultados da seção 2.2 foram derivados sob a suposição de que a mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs seja válida para sistemas com interações de longo alcance como o modelo HMF. No entanto, esses sistemas relaxam primeiramente para estados quasi-estacionários de não-equilíbrio, com distribuições que não são de Maxwell-Boltzmann. Portanto, outra análise deve ser feita, usando simulações computacionais para levar em consideração a dinâmica desses sistemas.

### 2.3.1 Dinâmica Molecular

Consideramos uma distribuição de um nível, conhecida como distribuição tipo waterbag, uniforme sobre uma área retangular no espaço de fase, centrada em  $(\theta, p) = (0, 0)$ ,

$$f_0(\theta, p) = \eta \Theta(\theta_m - |\theta|) \Theta(p_m - |p|), \quad (2.34)$$

onde  $\Theta(x)$  é a função degrau de Heaviside. As constantes  $\eta$  (densidade),  $\theta_m$  ( $\theta$  máximo) e  $p_m$  ( $p$  máximo) são determinadas pela normalização da distribuição, magnetização inicial do sistema e energia, respectivamente. As integrais sobre  $p$  e  $\theta$  das funções degrau equivalem a trocar os limites de integração  $\infty$  e  $\pi$  por  $p_m$  e  $\theta_m$ . Assim,

$$1 = \eta \int_{-\theta_m}^{\theta_m} d\theta \int_{-p_m}^{p_m} dp, \quad (2.35)$$

$$M = \eta \int_{-\theta_m}^{\theta_m} d\theta \int_{-p_m}^{p_m} dp \cos \theta \quad (2.36)$$

e

$$\varepsilon = \eta \int_{-\theta_m}^{\theta_m} d\theta \int_{-p_m}^{p_m} dp \frac{p^2}{2} + \frac{1 - M^2}{2} \quad (2.37)$$

levam a

$$\eta = \frac{1}{4\theta_m p_m}, \quad (2.38)$$

$$M = \frac{\sin \theta_m}{\theta_m} \quad (2.39)$$

e

$$p_m = \sqrt{3(2\varepsilon - 1 + M^2)}. \quad (2.40)$$

Dada a condição inicial  $(M_0, \varepsilon)$ , as equações (2.39) e (2.40) determinam os limites da distribuição water-bag no espaço de fase.

Na dinâmica molecular, para simular um sistema com  $N$  partículas, utilizamos dois vetores de dimensão  $N/2$ , onde a  $i$ -ésima componente do primeiro vetor representa o ângulo  $\theta_i$  da  $i$ -ésima partícula, e da mesma forma a  $i$ -ésima componente do segundo vetor é o momentum  $p_i$  da respectiva partícula. Como condição inicial, cada  $\theta_i$  e  $p_i$  assume um valor aleatório nos intervalos  $-\theta_m, \theta_m$  e  $-p_m, p_m$  respectivamente. Para cada uma dessas partículas, consideramos que existe uma partícula em posição simétrica no espaço de fase:  $\theta_{i+N/2} = -\theta_i$  e  $p_{i+N/2} = -p_i$ , o que garante a conservação de  $M_y = 0$  e torna a simulação mais rápida, pois a evolução é simétrica e precisamos integrar o movimento de apenas metade das partículas.

Através das equações de Hamilton, cada partícula segue a equação de movimento  $\ddot{\theta}_i = \dot{p}_i = -\partial H/\partial \theta_i$ , ou

$$\begin{aligned} \ddot{\theta}_i &= -\frac{1}{N} \sin \theta_i \sum_{j=1}^N \cos \theta_j + \frac{1}{N} \cos \theta_i \sum_{j=1}^N \sin \theta_j \\ &= -M_x \sin \theta_i + M_y \cos \theta_i \end{aligned}$$

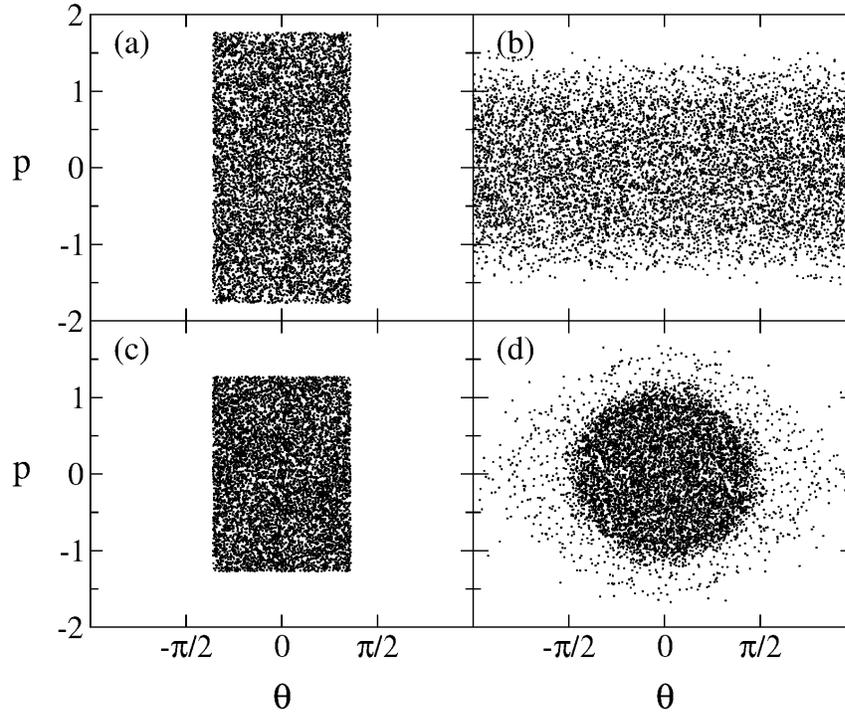
ou, lembrando que  $M_y = 0$  e  $M = M_x$ ,

$$\ddot{\theta}_i = -M \sin \theta_i \tag{2.41}$$

A integração numérica foi implementada usando um integrador simplético de quarta ordem [21], disponibilizado online por E. Hairer [22]. Para controlar a precisão numérica, conferimos o erro na conservação da energia média por partícula  $\varepsilon$  dada pela equação (2.8), mantendo-o em torno de  $10^{-8}$ .

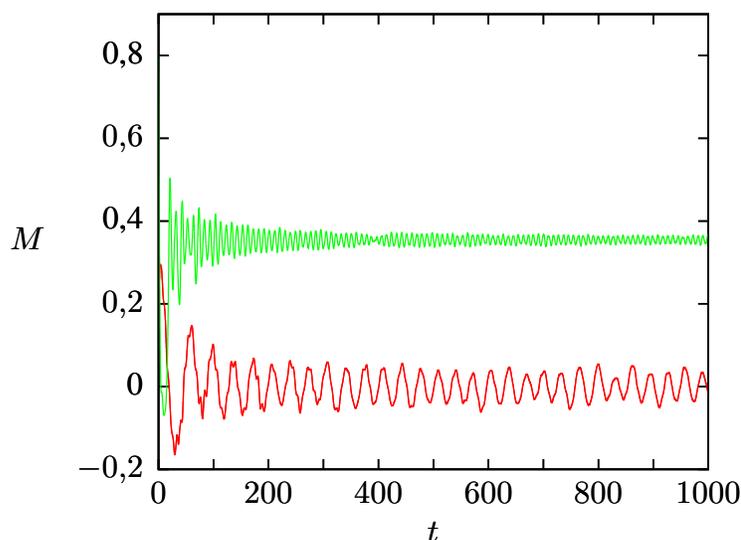
A figura 2.4 mostra exemplos de duas distribuições iniciais (painéis (a) e (c)) e as respectivas distribuições após o relaxamento para o estado quasi-estacionário (painéis (b) e (d)). As simulações foram feitas com  $N = 20000$  partículas. A magnetização inicial é a mesma nas duas simulações ( $M_0 = 0,8$ ), o que equivale a ter o mesmo limite  $\theta_m$ . Os limites em  $p$ , no entanto, são diferentes, pois a energia média  $\varepsilon$  difere nos dois casos. A energia da fileira superior é maior que a energia da simulação da fileira inferior ( $\varepsilon = 0,7$  e  $\varepsilon = 0,45$ , respectivamente); portanto, o limite  $p_m$  do painel (a) é maior que o limite  $p_m$  do painel (c). As duas condições iniciais levam à fases diferentes: a de maior energia leva

a uma configuração paramagnética, homogênea em  $\theta$  (painel (b)), enquanto a de menor energia permanece magnetizada, na fase ferromagnética (painel (d)). Ambos painéis (b) e (d) correspondem às distribuições no tempo de simulação  $t = 5000$ .



**Fig. 2.4:** *Distribuições no espaço de fase da dinâmica molecular com  $N = 20000$ . Na coluna esquerda, as distribuições iniciais, com  $\varepsilon = 0,7$  (a) e  $\varepsilon = 0,45$  (c), e  $M_0 = 0,8$  nos dois casos. A coluna direita mostra as duas possíveis fases do estado quasi-estacionário: paramagnético (b) e ferromagnético (d).*

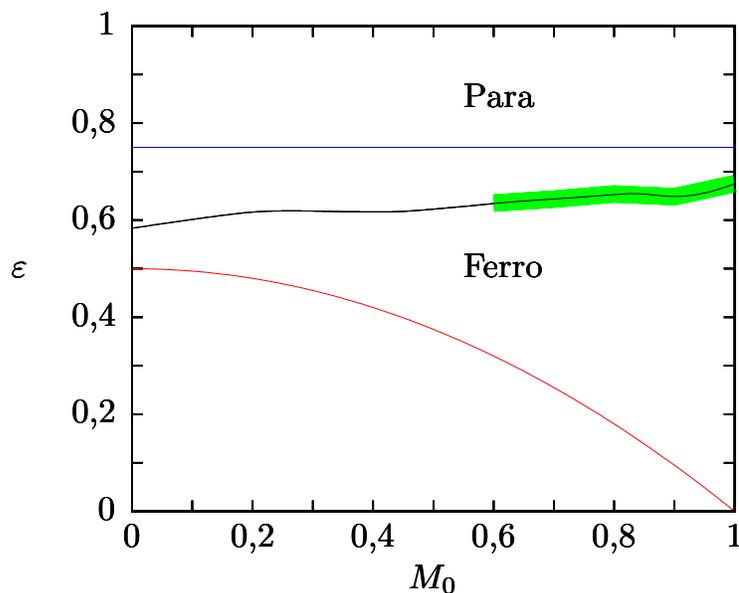
A fase que o sistema atingirá depende não apenas da energia média  $\varepsilon$  como também da magnetização inicial  $M_0$ . Essa dependência é exemplificada na figura 2.5, que mostra a evolução temporal da magnetização de dois sistemas de mesma energia e diferentes valores de  $M_0$ . Simulamos a dinâmica de dois sistemas de energia média  $\varepsilon = 0,62$ , compostos por  $N = 10^6$  partículas. Quando a magnetização inicia em  $M_0 = 0,2$ , ela decai rapidamente e oscila em torno de  $M = 0$ , enquanto o sistema de magnetização inicial mais alta,  $M_0 = 0,8$ , permanece magnetizado. Nos dois casos, a magnetização  $M(t)$  oscila em torno de seu valor quasi-estacionário  $M_s$ , dado pelo valor médio de  $M(t)$  após a primeira relaxação do sistema. No sistema de menor energia,  $M_s = 0$  (fase paramagnética), e no sistema de maior energia  $M_s > 0$  e a fase é ferromagnética.



**Fig. 2.5:** Magnetização em função do tempo da simulação numérica da dinâmica de  $N$  corpos. Para uma mesma energia,  $\varepsilon = 0,62$ , magnetizações iniciais diferentes resultam em fases diferentes (ferromagnética para  $M_0 = 0,8$  e paramagnética para  $M_0 = 0,2$ ).

Realizando simulações para diferentes condições iniciais, construímos um diagrama de fase de não-equilíbrio do modelo HMF, exibido na figura 2.6. No equilíbrio, a energia crítica é a mesma para qualquer magnetização inicial, e a transição é representada por uma reta de declividade nula no diagrama de fase em  $\varepsilon = 0,75$ . Por outro lado, a transição entre fases ferromagnética e paramagnética dos estados quasi-estacionários ocorre em diferentes valores de  $\varepsilon$ , dependendo da magnetização inicial. A linha crítica de equilíbrio e a de não-equilíbrio são representadas no diagrama de fase por uma linha sólida e uma tracejada-pontilhada, respectivamente. A curva pontilhada mostra a menor energia possível dado um valor de  $M_0$ . Como  $M_0$  determina a energia potencial inicial, a energia mínima é aquela com energia cinética nula, ou seja,  $\varepsilon_{\min} = (1 - M_0^2)/2$ . O diagrama também mostra uma região na qual a transição de não-equilíbrio não é bem definida: a larga linha sombreada em torno da linha crítica para  $M_0 > 0,6$ , aproximadamente. Para esses valores de  $M_0$ , existem regiões da energia média  $\varepsilon$ , acima da linha crítica, para as quais o sistema permanece magnetizado.

Os resultados da evolução da magnetização através da dinâmica molecular de  $N$  corpos nos indicam a existência de estados quasi-estacionários. O diagrama de fase mostra



**Fig. 2.6:** Diagrama de fase do modelo HMF. A linha sólida demarca a transição de não-equilíbrio, obtida através de simulações da dinâmica molecular de  $N$  corpos. Em torno dessa linha, para  $M_0 > 0,6$  aproximadamente, a barra verde mostra uma região na qual a linha de transição não é bem definida e existem reentrâncias (pequenas regiões ferromagnéticas acima da linha crítica, dentro da região paramagnética). A transição de equilíbrio, dada por  $\varepsilon = 0,75$  para qualquer magnetização inicial, é representada pela linha azul traço-pontilhada. A linha vermelha e pontilhada delimita a mínima energia necessária para cada valor de  $M_0$ .

a dependência da energia crítica com a magnetização inicial, contrariando a solução de equilíbrio. A transição de não-equilíbrio ocorre para energias menores que a energia crítica de equilíbrio, embora as reentrâncias de  $M_0 \approx 1$  atinjam energias maiores que  $\varepsilon = 0,75$ . Conforme discutido na introdução dessa dissertação, é a natureza de longo alcance das interações do potencial que determina o relaxamento para esses estados quasi-estacionários fora de equilíbrio.

### 2.3.2 Limite termodinâmico e dinâmica de Vlasov

Ao contrário da relaxação colisional para o equilíbrio de sistemas com interações de curto alcance, sistemas com interações de longo alcance são caracterizados por uma relax-

ação não-colisional. O escalonamento do potencial com  $1/N$  (prescrição de Kac) torna as correlações entre partículas desprezíveis frente à interação de cada partícula com o campo médio. Essas correlações ocupam o papel das colisões dos sistemas de curto alcance, e quando elas se tornam desprezíveis, o termo colisional da equação de Boltzmann também é reduzido: ele escala com  $1/N$  para sistemas com longo alcance [2]. Ao tomarmos o limite termodinâmico,  $N \rightarrow \infty$ , o termo colisional vai à zero e a dinâmica passa a ser regida pela equação de Vlasov, ou equação de Boltzmann não-colisional, dada por

$$\frac{\partial f}{\partial t} + p \frac{\partial f}{\partial \theta} + F(\theta) \frac{\partial f}{\partial p} = 0, \quad (2.42)$$

onde  $F(\theta) = \ddot{p}$  e  $f(\theta, p)$  é a função distribuição de uma partícula.

A função distribuição evolui como um fluido incompressível no espaço de fase. Qualquer integral de um funcional da forma  $C[h] = \int h[f(\theta, p, t)] dp d\theta$  é conservada por essa dinâmica. Tais integrais são chamadas de invariantes de Casimir [23]. Existe uma quantidade infinita de invariantes de Casimir, inclusive a entropia  $s = \int f(\theta, p, t) \ln f(\theta, p, t) dp d\theta$ . Discretizando  $f(\theta, p, t)$  em níveis de valor  $\eta_i$ , cada hipervolume  $\int \delta(f(\theta, p, t) - \eta_i) dp d\theta$  é preservado. A distribuição evolui infinitamente no espaço de fase, filamentando-se em escalas de comprimento cada vez menores, mas sempre preservando os hipervolumes. Em algum momento, no entanto, a distribuição parecerá estacionária, pois a evolução estará em uma escala de comprimento além da resolução disponível em experimentos ou simulações numéricas. Chamamos de macroscópica a escala de observação em que a distribuição parece estacionária e de microscópica a que ela ainda evolui<sup>1</sup>. A distribuição macroscópica, denominada  $\bar{f}$  para diferenciá-la da distribuição microscópica  $f(\theta, p, t)$ , é a que descreve os estados quasi-estacionários de sistemas com interações de longo alcance.

Devido ao número infinito de quantidades conservadas, existem infinitas soluções estacionárias da equação de Vlasov. A determinação da distribuição estacionária, para qualquer condição inicial, é um problema para várias áreas da física, como física de plasmas e astrofísica. Foi no contexto da última que uma das primeiras teorias estatísticas para tratar desse problema foi proposta.

---

<sup>1</sup> Os termos macroscópico e microscópico correspondem a *coarse-grained* e *fine-grained* no inglês.

### 2.3.3 Teoria de Lynden-Bell

Na astrofísica, em torno da metade do século XX, o problema de determinar as distribuições de massa de sistemas estelares após a relaxação não-colisional começou a ser estudado intensivamente, por exemplo por Camm [24] e Lecar [25], entre outros. Em 1967, o astrofísico D. Lynden-Bell propôs uma teoria estatística baseada na dinâmica de Vlasov para descrever essas distribuições, conhecida como a teoria da relaxação violenta [12]. No entanto, simulações numéricas mostraram divergências entre as distribuições resultantes da dinâmica molecular e as previstas pela teoria de Lynden-Bell [26, 27]. Apesar disso, essa teoria gerou interesse na comunidade de sistemas de interações de longo alcance, e foi utilizada para estudar outros sistemas além do autogravitante, como o modelo HMF [28, 29, 23].

O princípio por trás da teoria da relaxação violenta é a incompressibilidade da função distribuição no espaço de fase sob a dinâmica de Vlasov, descrita na subseção anterior. Em função das duas escalas de resolução da dinâmica, a macroscópica e a microscópica (ver subseção 2.3.2), a abordagem de Lynden-Bell consiste em discretizar o espaço de fase em macrocélulas de volume  $d\theta dp$ , e cada macrocélula em  $\nu$  microcélulas de volume  $h$ . Ele definiu uma entropia macroscópica, cuja maximização determina a função distribuição estacionária  $\bar{f}$ . A seguir, mostraremos a dedução da entropia de Lynden-Bell para uma distribuição inicial tipo water-bag, dada pela equação (2.34), conforme a dedução apresentada em seu trabalho de 1967. Além disso, consideraremos apenas uma dimensão. Convém informar que uma dedução mais geral pode ser feita, para outras distribuições iniciais e em  $d$  dimensões, e pode ser encontrada nas referências [30, 11].

Começamos com uma distribuição de  $N$  elementos de fase de densidade  $\eta$ , cada um ocupando uma microcélula. Devido à conservação do volume da função distribuição, a densidade em cada microcélula poderá ter apenas dois valores: zero (microcélula desocupada) ou  $\eta$  (microcélula ocupada). A  $i$ -ésima macrocélula, por sua vez, tem densidade  $\bar{f}_i = \eta n_i / \nu$ , onde  $n_i$  é o número de microcélulas ocupadas dentro da macrocélula. O maior valor possível de  $\bar{f}_i$  é  $\eta$ . Com essa configuração, pode-se calcular uma entropia macroscópica, fazendo uma contagem do número de possíveis microestados  $\Omega$ ,

$$\Omega = \left( \frac{1}{N!} \right) \left( \frac{N!}{\prod_i n_i!} \right) \left( \prod \frac{\nu!}{(\nu - n_i)!} \right). \quad (2.43)$$

O segundo termo na expressão (2.43) é o número de maneiras de dividir  $N$  elementos de fase em grupos de quantidade  $n_i$ , o termo à direita é o número de maneiras de distribuir

$n_i$  elementos de fase entre  $\nu$  microcélulas, e o primeiro termo  $1/N!$  é da contagem correta de Boltzmann. A entropia é dada por

$$S = k_B \ln \Omega = -k_B \sum_i \frac{\nu}{\eta} [\bar{f}_i \ln \bar{f}_i + (1 - \bar{f}_i) \ln(1 - \bar{f}_i)], \quad (2.44)$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann e substituímos  $n_i/\nu = \bar{f}_i/\eta$ . Foi usada a aproximação de Stirling,  $\lim N \rightarrow \infty \ln N! = N \ln N - N$ . Finalmente, tomamos o limite infinitesimal, passando de um somatório sobre macrocélulas para a integração sobre o espaço de fase. Para tanto, observamos também que  $\nu h = d\theta dp$ . Assim,

$$S = k_B \ln \Omega = -k_B \int d\theta dp \frac{1}{h\eta} [\bar{f}(\theta, p) \ln \bar{f}(\theta, p) + (1 - \bar{f}(\theta, p)) \ln(1 - \bar{f}(\theta, p))]. \quad (2.45)$$

Para achar  $\bar{f}(\theta, p)$ , maximiza-se  $S$  com os vínculos de conservação de energia e normalização, usando os multiplicadores de Lagrange  $\beta/\eta_0$  e  $\mu/\eta_0$ . A distribuição resultante é

$$\bar{f}(\theta, p) = \eta \frac{e^{-\beta(\epsilon(\theta, p) - \mu)}}{1 + e^{-\beta(\epsilon(\theta, p) - \mu)}}. \quad (2.46)$$

Para o modelo HMF,  $\epsilon(\theta, p)$  é dado pela equação (2.9), e

$$\bar{f}(\theta, p) = \eta \frac{e^{-\beta(p^2/2 + 1 - M[\bar{f}] \cos \theta - \mu)}}{1 + e^{-\beta(p^2/2 + 1 - M[\bar{f}] \cos \theta - \mu)}}, \quad (2.47)$$

onde  $M(\bar{f}) = \int \bar{f} \cos \theta dp d\theta$ . O termo  $\eta$  já é conhecido pela equação (2.38). Os fatores  $\beta$  e  $\mu$  são determinados numericamente por conservação de energia e norma, resolvendo o sistema de equações

$$\varepsilon = \frac{\eta}{2} \int p^2 [1 + \exp(\beta p^2/2 - \beta M(\bar{f}) \cos \theta + \mu)]^{-1} dp d\theta + \frac{1 - M(\bar{f})^2}{2}, \quad (2.48)$$

$$1 = \eta \int [1 + \exp(\beta p^2/2 - \beta M(\bar{f}) \cos \theta + \mu)]^{-1} dp d\theta \quad (2.49)$$

e

$$M = \eta \int \cos \theta [1 + \exp(\beta p^2/2 - \beta M(\bar{f}) \cos \theta + \mu)]^{-1} dp d\theta. \quad (2.50)$$

Assim, para qualquer condição inicial  $(\varepsilon, M_0)$ , pode-se determinar a distribuição estacionária  $\bar{f}_{LB}(\theta, p)$ . É importante observar que esse resultado depende da hipótese de boa mistura da função distribuição no espaço de fase, ou seja, que  $f(\theta, p)$  consiga explorar todo o espaço de fase. Se houver quebra de ergodicidade, o processo de contagem de microestados feito na dedução da entropia de Lynden-Bell não é aplicável. Conforme discutido

na introdução, isso pode ocorrer quando o sistema desenvolver fortes oscilações coletivas. Por exemplo, os estados estacionários de plasmas não-neutros e sistemas autogravitantes devem obedecer a condição virial, dada por  $2K = \lambda U$ , onde  $K$  e  $U$  são a energia cinética e potencial médias, respectivamente, e o potencial entre corpos é uma função homogênea de ordem  $\lambda$ . Quando a condição inicial não obedece à condição virial, esses sistemas oscilam até atingir um estado em que a ela é satisfeita, e nesse processo ficam presos em um estado tipo núcleo-halo [30, 11]. Usando resultados de dinâmica molecular, foi mostrado que nesses casos a teoria de relaxação violenta não funciona, e só há uma boa concordância entre a distribuição  $\bar{f}_{LB}$  e simulações numéricas quando o sistema começa na condição virial e não desenvolve oscilações [30, 11]. No caso do modelo HMF, no entanto, não há condição virial, pois o potencial não é uma função homogênea. Assim, precisamos achar outro método para estudar as oscilações do sistema: o método perturbativo da equação de envelope.

### 2.3.4 Equação de envelope

Queremos descrever as oscilações coletivas do sistema. De acordo com a equação (2.41), o movimento das partículas para o sistema HMF é determinado pela magnetização total do sistema, que também depende do tempo. A magnetização é essencialmente uma medida da aglomeração angular das partículas. Supomos então que as oscilações da magnetização possam ser descritas pelas oscilações de um envelope que descreve o limite em  $\theta$  entre a região ocupada e a região desocupada do espaço de fase.

O envelope é definido como

$$\theta_e(t) = \sqrt{3\langle\theta^2(t)\rangle} \quad (2.51)$$

onde o fator  $\sqrt{3}$  é usado para que  $\theta_e(t=0) = \theta_m$ . Derivando  $\theta_e$  duas vezes em relação ao tempo, obtemos a equação de movimento

$$\ddot{\theta}_e(t) = \frac{3\langle\dot{\theta}^2(t)\rangle}{\theta_e(t)} + \frac{3\langle\theta\ddot{\theta}(t)\rangle}{\theta_e(t)} - \frac{9\langle\theta(t)\dot{\theta}(t)\rangle^2}{\theta_e^3(t)}. \quad (2.52)$$

No primeiro termo, a velocidade quadrática média  $\langle\dot{\theta}^2(t)\rangle$  é  $2\varepsilon - 1 + M^2(t)$ , devido a conservação de energia. Para calcular as outras médias, faremos a suposição de que a densidade da função distribuição permanece uniforme no intervalo  $[-\theta_e(t), \theta_e(t)]$ , uma aproximação válida apenas para tempos curtos. Como as ressonâncias determinam a dinâmica nas primeiras oscilações, a aproximação é razoável. Usando a distribuição uniforme dentro do

envelope, o valor médio do segundo termo da equação (2.52) é dado por

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

O último termo da equação (2.52) é nulo, desprezando correlações entre  $\theta$  e  $\dot{\theta}$ . Reunindo todos os termos, a equação de movimento para o envelope é

$$\ddot{\theta}_e(t) = \frac{3}{\theta_e} (2\varepsilon + M_e(t) \cos \theta_e - 1), \quad (2.53)$$

onde usamos

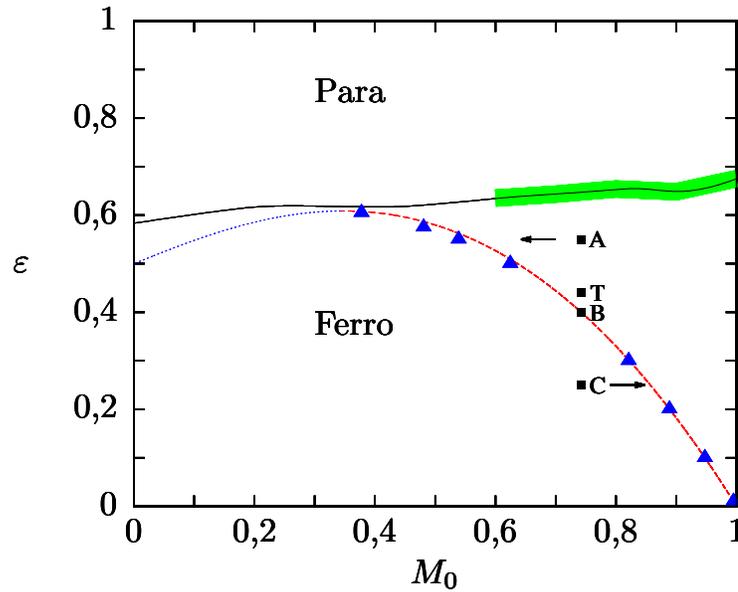
$$\begin{aligned}
 M_e(t) &= \frac{1}{2\theta_e(t)} \int_{-\theta_e(t)}^{\theta_e(t)} \cos \theta d\theta \\
 &= \frac{\sin \theta_e(t)}{\theta_e(t)}.
 \end{aligned} \quad (2.54)$$

A condição análoga à condição virial, ou seja, a condição em que o sistema não oscilará, pode ser determinada igualando a equação (2.53) a zero. Nessa situação, o envelope será estacionário e a magnetização permanecerá constante:  $\theta_e(t) = \theta_m$  e  $M_e(t) = M_0$ . Obtemos

$$0 = \frac{3}{\theta_m} (2\varepsilon + M_0 \cos \theta_m - 1), \quad (2.55)$$

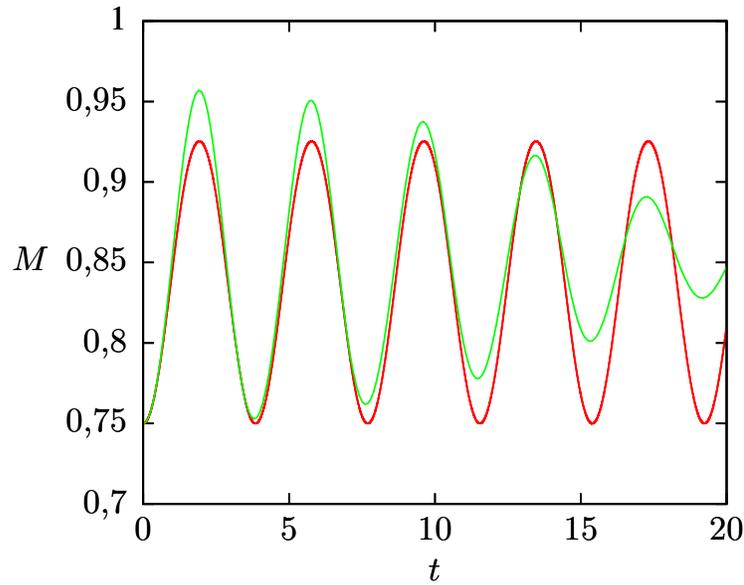
que denominamos *curva virial generalizada* (CVG) [7]. Ela determina uma curva no espaço de parâmetros  $(M_0, \varepsilon)$ , indicando as condições iniciais para as quais o sistema não oscilará.

A figura 2.7 mostra a CVG no diagrama de fase de não-equilíbrio do modelo HMF. Os pontos  $A$ ,  $B$  e  $C$  e representam os estados iniciais de simulações de dinâmica molecular: acima da CVG  $(M_0, \varepsilon)_A = (0,742, 0,55)$ , na CVG  $(M_0, \varepsilon)_B = (0,742, 0,4)$  e abaixo da CVG  $(M_0, \varepsilon)_C = (0,742, 0,25)$ . As setas ao lado dos pontos  $A$  e  $C$ , apontando para a CVG, indicam que os estados estacionários atingidos por esses dois sistemas são próximos à CVG, ou seja, a magnetização estacionária tende ao valor de  $M$  prevista para a CVG para as correspondentes energias. O ponto  $B$ , que inicia sobre a CVG, permanece sobre ela. Os diamantes representam a magnetização estacionária e energia de resultados de dinâmica molecular com estados iniciais sobre a CVG.



**Fig. 2.7:** Diagrama de fase do modelo HMF exibindo a curva virial generalizada (linha vermelha e tracejada). A continuação dessa linha, a linha azul e pontilhada em  $M_0 < 0,343$ , mostra uma solução instável da equação (2.55). Os triângulos representam os valores da magnetização estacionária  $M_s$  de sistemas com condições iniciais  $(M_0, \epsilon)$  sobre a CVG (o valor de  $\epsilon$  permanece constante, pois a energia é preservada). A magnetização estacionária foi determinada por dinâmica molecular de  $N$  corpos. Os pontos A, B e C mostram o estado inicial dos sistemas referentes à figura 2.9, e T e B à figura 2.10. As setas ao lado de A e C indicam que a magnetização estacionária correspondentes a essas condições iniciais é próxima ao previsto pela CVG para as dadas energias.

Para quaisquer condições iniciais fora da CVG, deverá haver oscilação. Uma comparação entre as oscilações da magnetização de envelope  $M_e(t)$  e a magnetização de um sistema de  $N = 2 \times 10^6$  pode ser vista na figura 2.8. A magnetização inicial e energia do sistema são  $M_0 = 0,75$  e  $\epsilon = 0,25$ , fora da CVG. Há uma concordância razoável entre as duas magnetizações nas primeiras oscilações. A magnetização de envelope oscila com amplitude e período constante, pois não há amortecimento na equação de movimento do envelope. Enquanto o período de oscilação da magnetização do sistema de  $N$  corpos é muito semelhante ao do envelope, a amplitude é inicialmente maior, e em seguida, é amortecida.



**Fig. 2.8:** Comparação da magnetização  $M(t) = \sum_i \cos \theta_i / N$  da dinâmica molecular (linha tracejada) e da magnetização  $M_e(t) = \sin \theta_e(t) / \theta_e(t)$  do envelope (linha sólida). A condição inicial é  $(M_0 = 0.74, \varepsilon = 0.25)$ , fora da CVG.

### 2.3.5 Partículas teste

Em plasmas não-neutros e sistemas autogravitantes, as oscilações coletivas dos sistemas não-idealizados geram ressonâncias que excitam algumas partículas, transferindo energia a elas às custas das oscilações, em um processo de amortecimento de Landau não-linear [30, 11]. Para estudar as possíveis ressonâncias na dinâmica do modelo HMF, usamos um procedimento semelhante ao usado nas últimas referências citadas: a dinâmica de partículas teste.

Consideramos um conjunto de partículas, chamadas partículas teste, posicionadas no espaço de fase dentro da distribuição inicial dada pela equação (2.34). Sua dinâmica é determinada pela equação de movimento do modelo HMF (equação (2.41)). Porém, a magnetização dentro da equação de movimento é substituída por uma magnetização aproximada, que independe da posição das partículas teste. Ela atua, portanto, como um campo externo.

Usamos a magnetização de envelope  $M_e(t)$ , dada pela equação (2.54), como a magnetização aproximada na equação de movimento das partículas teste. Para tanto, integramos numericamente a equação de movimento do envelope (equação (2.53)) para determinar

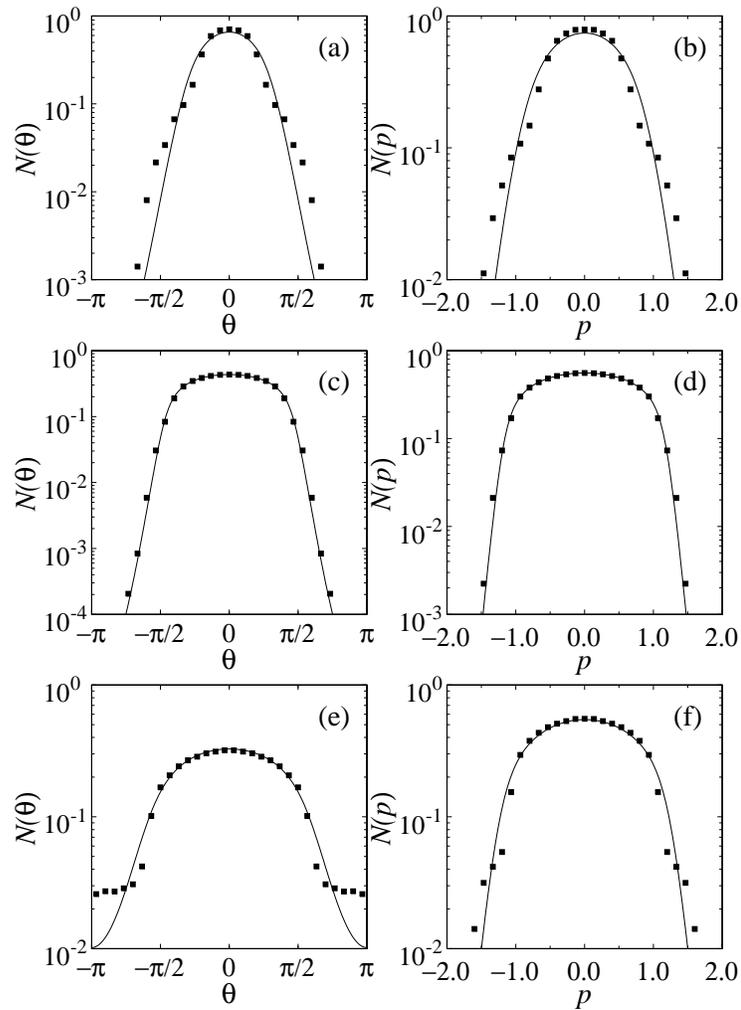
$M_e(t)$  e, simultaneamente, a equação de movimento de  $N_p$  partículas teste (equação (2.41) com  $M(t) = M_e(t)$ ). O resultado dessa dinâmica possibilita uma comparação entre a teoria perturbativa do envelope oscilante e a dinâmica completa de  $N$  corpos, localizando ressonâncias paramétricas.

### 2.3.6 Ressonâncias paramétricas e quebra de ergodicidade

O objetivo de encontrar a condição virial generalizada é poder determinar a natureza do estado estacionário, dada uma condição inicial  $(M_0, \varepsilon)$ . Quando o sistema encontra-se inicialmente sobre a CVG, a ausência de fortes oscilações deve resultar em uma dinâmica quasi-ergódica, sem ressonâncias. Nesse caso, a condição de mistura e ergodicidade da função distribuição, necessária para a estatística de Lynden-Bell, seria satisfeita. Na figura 2.9, comparamos as distribuições em ângulo e em velocidade da estatística de Lynden-Bell com as obtidas por dinâmica molecular para três casos. Todos iniciam com a mesma magnetização ( $M_0 = 0,742$ ), mas diferentes energias: abaixo da CVG ( $\varepsilon = 0,25$ ), sobre a CVG ( $\varepsilon = 0,4$ ) e acima da CVG ( $\varepsilon = 0,55$ ). As duas distribuições coincidem para o sistema inicialmente sobre a CVG, enquanto as outras exibem divergências, pois os resultados da dinâmica de  $N$  partículas indicam a formação de uma estrutura tipo núcleo-halo que a estatística de Lynden-Bell não descreve.

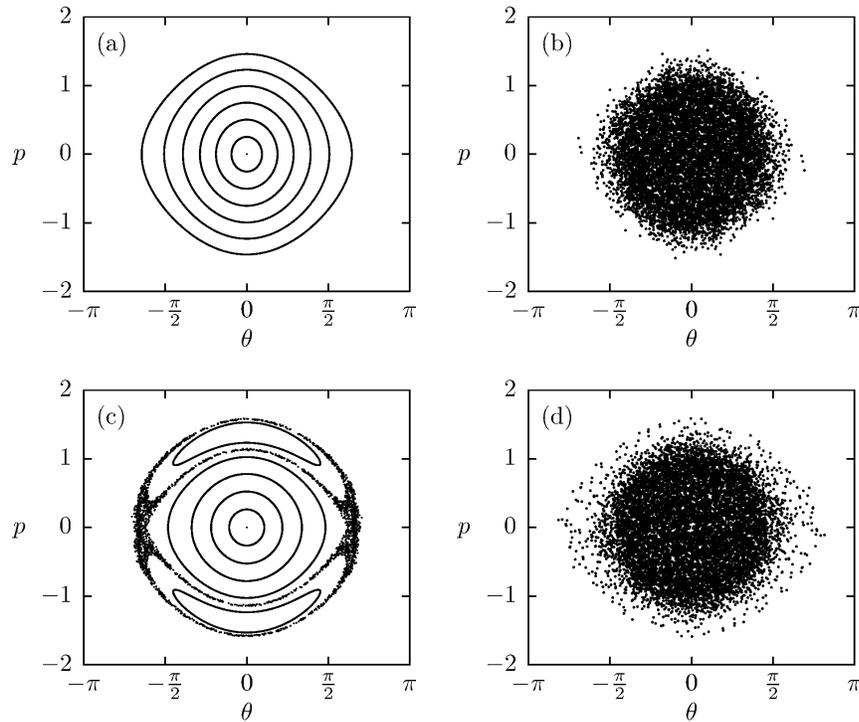
A dinâmica inicial do sistema é fundamental para determinar o perfil da distribuição estacionária, pois as oscilações podem levar o sistema para um estado tipo núcleo-halo em que a ergodicidade é quebrada. O amortecimento das oscilações de  $M(t)$  diminui a transferência de energia para as partículas do halo, prendendo o sistema nessa configuração. Dessa forma as ressonâncias, que são possíveis apenas quando houver oscilações, causam a quebra de ergodicidade: elas levam partículas à regiões de alta energia — regiões que seriam inacessíveis se não houvesse ressonâncias — e após o amortecimento das oscilações, essas partículas ficam presas no halo, pois no limite termodinâmico não há mais como haver transferência de energia entre elas e as partículas que estão no núcleo. Nesse ponto, a função distribuição deixa de ser ergódica, pois halo e núcleo não se misturam.

A relação entre ressonância e halo é ilustrada na figura 2.10. Ela mostra as seções de Poincaré de partículas teste para condições iniciais na CVG e fora da CVG, ao lado dos respectivos espaços de fase da dinâmica molecular de  $N$  corpos [7]. No caso virial, a seção de Poincaré não mostra ressonâncias, apenas órbitas regulares, enquanto no caso não-virial, há ilhas de ressonância ao redor da região central de órbitas regulares. Notamos que nos



**Fig. 2.9:** *Distribuições em ângulo na esquerda e em velocidade na direita dos estados estacionários da dinâmica molecular de  $N$  corpos (quadrados) e da teoria de relaxação violenta (linhas). Superior (a),(b):  $M_0 = 0,742, \varepsilon = 0,25$  (fora da CVG). Meio (c),(d):  $M_0 = 0,742, \varepsilon = 0,4$  (na CVG). Inferior (e),(f):  $M_0 = 0,742, \varepsilon = 0,55$  (fora da CVG).*

espaços de fase, no primeiro caso, o halo é quase inexistente, enquanto no segundo ele é bem demarcado e sua localização no espaço de fase condiz com as regiões de ressonância na seção de Poincaré.



**Fig. 2.10:** *Esquerda: seções de Poincaré da dinâmica de partículas teste. Direita: espaço de fase da dinâmica molecular de  $N = 10^5$  corpos. Superior: condições iniciais na CVG ( $M_0 = 0,742, \varepsilon = 0,4$ ) – ponto B da figura 2.7. Inferior: condições iniciais fora da CVG ( $M_0 = 0,742, \varepsilon = 0,44$ ) – ponto T da figura 2.7.*

### 2.3.7 Distribuição núcleo-halo

A dinâmica que conduz a distribuição à separar-se em duas regiões distintas, núcleo e halo, é caracterizada por fortes oscilações coletivas, que são amortecidas ao longo do processo de transferência de energia do núcleo para as partículas ressonantes do halo. Quando toda a energia livre do núcleo é esgotada, as oscilações cessam. O núcleo não pode, no entanto, colapsar totalmente, pois ele obedece à dinâmica de Vlasov: o volume da função distribuição é preservado. Nenhum ponto no espaço de fase pode ter densidade maior que a densidade da distribuição inicial. Dessa forma, as partículas devem ocupar as regiões menos energéticas ainda disponíveis do espaço de fase, de maneira similar a um gás de Fermi. Por isso, o perfil do núcleo pode ser aproximado por uma distribuição de Fermi com temperatura  $T = 0$ , de densidade  $\eta$  igual à densidade inicial da distribuição water-bag, e delimitado pela energia de Fermi  $\epsilon_F$ . O halo, por sua vez, também pode ser

considerado como tendo uma densidade constante  $\chi$ , pois a dinâmica caótica das partículas ressonantes que o populam deve resultar na ocupação uniforme da região  $\epsilon_F < \epsilon < \epsilon_h$ .

Assim, o estado tipo núcleo-halo é aproximado por uma função distribuição de dois níveis [11],

$$f_{\text{NH}}(\epsilon) = \eta\Theta(\epsilon_F - \epsilon) + \chi\Theta(\epsilon - \epsilon_F)\Theta(\epsilon_h - \epsilon), \quad (2.56)$$

onde  $\epsilon_F$  é a energia que separa núcleo e halo,  $\epsilon_h$  é a energia máxima do halo, e  $\eta$  e  $\chi$  são as densidades do núcleo e do halo, respectivamente.

A energia  $\epsilon_h$  é a maior energia atingida por uma partícula ressonante. No entanto, é inconveniente realizar uma simulação completa de dinâmica molecular para determiná-la. Obtivemos a energia do halo pela dinâmica das partículas teste, descrita na subseção 2.3.5. Ao fazer a simulação de seu movimento, acompanhamos suas energias individuais durante algumas oscilações e definimos como energia do halo,  $\epsilon_h$ , a maior energia atingida por uma partícula teste.

Os parâmetros  $\epsilon_F$  e  $\chi$  são determinados através da conservação de energia e norma,

$$1 = \int f_{\text{NH}}(\theta, p) dp d\theta \quad (2.57)$$

e

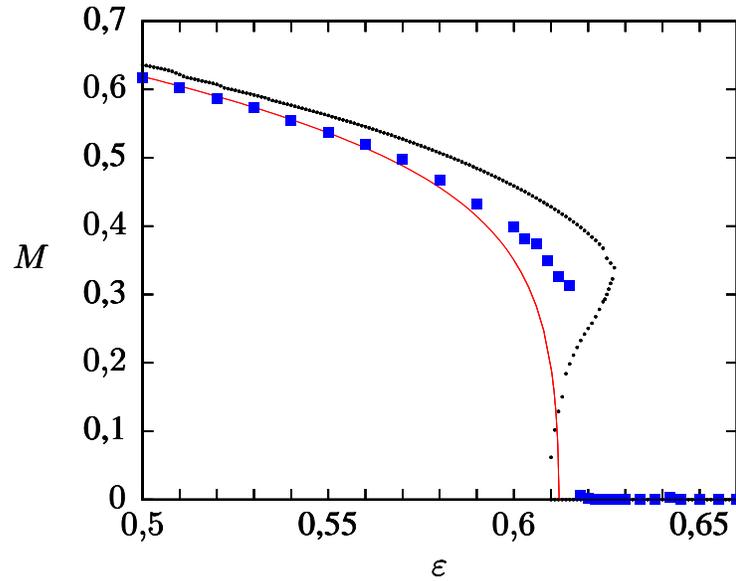
$$\varepsilon = \frac{1}{2} \int p^2 f_{\text{NH}}(\theta, p) dp d\theta + \frac{1}{2}(1 - M_s^2), \quad (2.58)$$

e a magnetização estacionária,  $M_s$ , através de

$$M_s = \int \cos \theta f_{\text{NH}}(\theta, p) d\theta dp. \quad (2.59)$$

Em 2011, Pakter e Levin [19], usaram esse método, mas com outra aproximação para  $M(t)$  na equação de movimento das partículas teste. Eles derivaram uma equação de movimento para a magnetização,  $\ddot{M}(t) = M\langle \sin^2 \theta \rangle - \langle p^2 \cos \theta \rangle \approx -M(2\varepsilon + M^2 - \frac{3}{2})/2$ , onde usaram as aproximações  $\langle \sin^2 \theta \rangle = 1/2$  e  $\langle p^2 \cos \theta \rangle = \langle p^2 \rangle \langle \cos \theta \rangle = (2\varepsilon - 1 + M^2)M$ . Mostraram que, assim como a dinâmica molecular, a teoria núcleo-halo prevê uma transição de primeira ordem em uma região onde a estatística de Lynden-Bell determina uma transição de segunda ordem [29].

Usando a equação de movimento do envelope e sua conseqüente magnetização, também encontramos uma transição de primeira ordem, conforme mostra a figura 2.11. A figura mostra a magnetização estacionária prevista pela teoria núcleo-halo (pontos pretos), resultante de dinâmica molecular (quadrados azuis) e a prevista pela relaxação violenta (linha

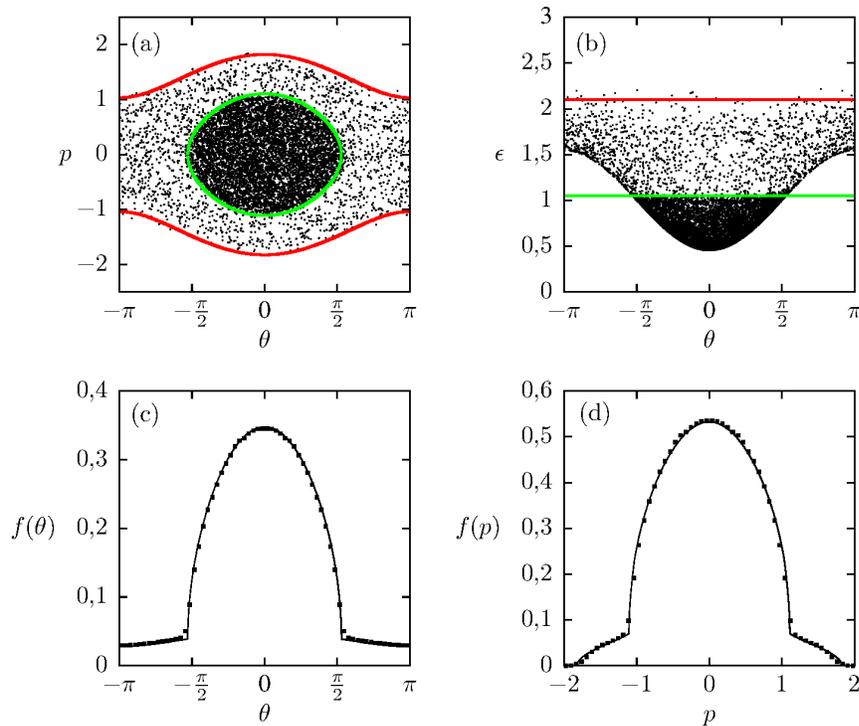


**Fig. 2.11:** Magnetização estacionária correspondente à teoria núcleo-halo (pontos pretos), à simulação da dinâmica de  $N = 2 \times 10^6$  partículas (quadrados azuis) e à teoria de relaxação violenta (linha vermelha).

vermelha). Embora a teoria apresentada aqui reproduz a transição de primeira ordem, em concordância com os resultados da dinâmica molecular, a magnetização prevista por ela é maior que esses mesmos resultados, que são descritos com maior precisão pela teoria de Lynden-Bell.

Uma explicação para essa discordância é a aplicação da equação de envelope para energias mais altas, perto da transição de fase. Se a energia do sistema for alta o suficiente, algumas partículas podem escapar do potencial confinador. Isso pode ser observado comparando os espaços de fase da figura 2.10, por exemplo, e o da figura 2.12. No primeiro, as partículas estão confinadas em torno do núcleo, enquanto que no segundo elas ocupam todo o espaço entre  $[-\pi, \pi)$ . Da mesma forma, para energias altas o envelope ultrapassa o limite de  $\theta_e = \pi$ ; porém, a equação de movimento do envelope não possui a periodicidade do potencial e torna-se inadequada nessas condições.

A distribuição núcleo-halo, no entanto, coincide com a distribuição atingida por dinâmica molecular. A figura 2.12 mostra (a) o espaço de fase; (b) a energia por partícula,  $\epsilon$ , em função de  $\theta$ ; (c) a distribuição em  $\theta$  e (d) a distribuição em  $p$  de uma simulação com condições iniciais ( $M_0 = 0,8, \epsilon = 0,55$ ) e  $N = 4 \times 10^4$  partículas. Utilizando para  $\epsilon_h$



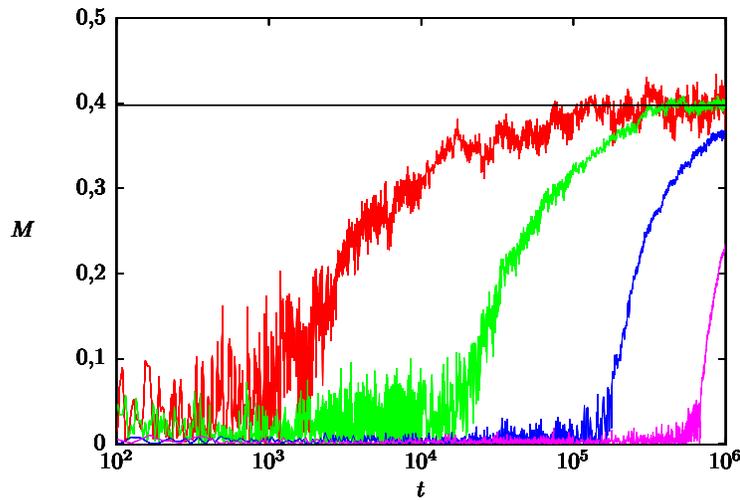
**Fig. 2.12:** Comparação de dinâmica molecular de  $N = 8 \times 10^5$  partículas e teoria núcleo-halo para  $(M_0 = 0,8, \epsilon = 0,55)$ . No painel (a), espaço de fase e curvas  $\epsilon = \epsilon_f$  (linha verde) e  $\epsilon = \epsilon_h$  (linha vermelha); em (b), energia de uma partícula  $\epsilon$  em função de  $\theta$ , e as energias  $\epsilon_h$  (linha vermelha) e  $\epsilon_f$  (linha verde); distribuição em  $\theta$  e em  $p$ , nos painéis (c) e (d) respectivamente, da simulação computacional (quadrados) e da teoria núcleo-halo (linhas). A energia  $\epsilon_h$  foi escolhida para representar o limite superior do halo.

um valor que representa o limite superior da distribuição de energia dessa simulação (linha azul na figura 2.12), determinamos as outras variáveis necessárias para a teoria núcleo-halo ( $\epsilon_f$ ,  $\chi$  e  $M_s$ ). As distribuições resultantes, também expostos na figura 2.12, coincidem com a simulação.

### 2.3.8 Relaxação para o equilíbrio

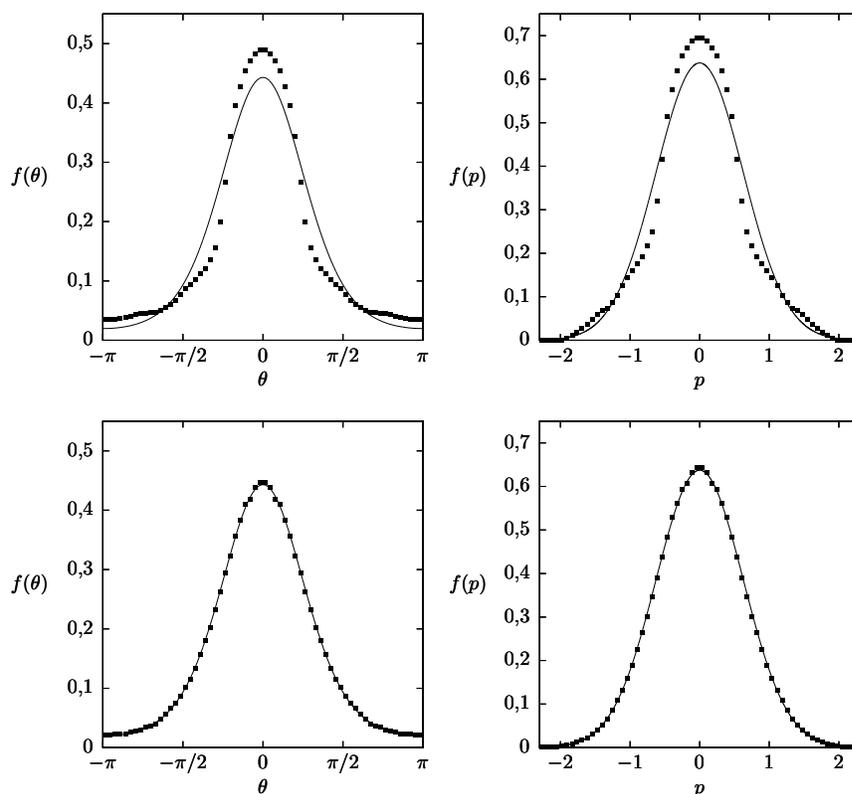
Para  $N$  finito, a duração do estado estacionário também é finita, e eventualmente uma segunda relaxação ocorre, devido às correlações entre as partículas. Essa segunda relaxação deve levar o sistema a uma distribuição de Maxwell-Boltzmann, com a magnetização dada

pela solução de equilíbrio (ver equações (2.29) e (2.32)). A aproximação do equilíbrio é ilustrada na figura 2.13, que mostra a evolução da magnetização para diferentes valores de  $N$ , em uma condição inicial em que o estado estacionário é homogêneo (paramagnético), mas o estado de equilíbrio é ferromagnético:  $M_0 = 0,4$  e  $\varepsilon = 0,65$ . Nessa energia, a magnetização de equilíbrio é dada por  $M_{eq} = 0,397$ , representada por uma linha preta na figura 2.13. A magnetização de sistemas com menos partículas aproxima-se mais rapidamente da magnetização de equilíbrio. Reescalando o tempo com  $N^\gamma$ , com  $\gamma \approx 1,5$ , as curvas colapsam sobre uma só, corroborando a constatação que os estados quasi-estacionários têm duração de tempo que escala com  $N^\gamma$ . O valor 1,5 é aproximado, pois usamos um número pequeno de amostras (apenas quatro valores de  $N$ , e apenas uma simulação realizada para cada um); mesmo assim, ele é próximo do valor encontrado em outros trabalhos para o modelo HMF,  $\gamma = 1,7$  [9].



**Fig. 2.13:** Magnetização em função do tempo para diferentes valores de  $N$ :  $N = 2000$  (vermelho),  $N = 10000$  (verde),  $N = 40000$  (azul) e  $N = 100000$  (magenta). Resultado de dinâmica molecular com condição inicial:  $M_0 = 0,4, \varepsilon = 0,65$ . Para essa energia, o estado de equilíbrio é ferromagnético, enquanto o qSS é paramagnético. A linha preta representa a magnetização de equilíbrio.

A figura 2.14 mostra  $f_{MB}(\theta) = \int f_{MB}(\theta, p) dp$  e  $f_{MB}(p) = \int f_{MB}(\theta, p) d\theta$  para  $\varepsilon = 0,51$  e compara com as distribuições de dinâmica molecular para  $M_0 = 0,0$  e  $\varepsilon = 0,51$ . A distribuição do estado estacionário (dinâmica molecular), em  $t = 10^5$ , é claramente diferente da distribuição de equilíbrio. Para obter uma boa concordância, a simulação foi



**Fig. 2.14:** *Distribuição em posição (esquerda) e velocidade (direita). Linhas representam distribuição de Maxwell-Boltzmann e quadrados representam resultado de dinâmica molecular em  $t = 10^5$  (superior) e  $t = 10^7$  (inferior),  $N = 2 \times 10^5$ .*

realizada por um período de tempo muito maior (na figura,  $t = 10^7$ ).

Desta maneira, a segunda relaxação exemplificada nas figuras 2.13 e 2.14 deixa clara a relação entre as teorias apresentadas nas duas últimas seções deste capítulo. Na seção 2.2, apresentamos os resultados previstos pela mecânica estatística de equilíbrio para o modelo HMF, no ensemble microcanônico. Contudo, sabemos que sistemas com interações de longo alcance atingem inicialmente estados quasi-estacionário fora de equilíbrio — abordados na seção subsequente, 2.3 — devido à predominância da dinâmica não-colisional no limite  $N \rightarrow \infty$ . Em testes com simulação computacional de dinâmica molecular, é impossível atingir esse limite de  $N$  infinito. Nesse caso, os efeitos de  $N$  finito (correlações entre as partículas) eventualmente causam uma segunda relaxação, levando ao equilíbrio térmico, em que os resultados obtidos na seção de mecânica estatística de equilíbrio tornam-se aplicáveis.

---

No próximo capítulo, essas duas abordagens para sistemas com interações de longo alcance — estados de equilíbrio e estados fora de equilíbrio — serão analisadas em outro sistema: o modelo HMF generalizado, ou gHMF. Ele é semelhante ao modelo HMF, porém apresenta um novo acoplamento, além do acoplamento ferromagnético visto no modelo HMF.

## Capítulo 3

# Modelo gHMF

O segundo modelo estudado é uma generalização do modelo HMF para incluir, além do acoplamento ferromagnético, um termo de acoplamento do tipo nemático, da forma  $\cos(q(\theta_i - \theta_j))$ , onde  $\theta_i$  é o ângulo da  $i$ -ésima partícula, e  $q \in \mathbb{N}$ . Essa adição no hamiltoniano introduz um novo parâmetro que torna o diagrama de fase mais complexo. Enquanto o modelo HMF, no equilíbrio, apresenta uma transição de fase para um único valor de energia, o diagrama de fase de equilíbrio do novo modelo será bidimensional, proporcionando mais condições para compararmos as transições de equilíbrio e de não-equilíbrio. Chamamos esse modelo de HMF generalizado (gHMF). Nesse capítulo, focaremos nas diferenças entre o diagrama de fase de equilíbrio, previsto pela estatística de Boltzmann-Gibbs, e o diagrama de fase de não-equilíbrio, correspondente ao estado quasi-estacionário que, no limite  $N \rightarrow \infty$ , é o estado estacionário final do sistema.

### 3.1 O modelo

O hamiltoniano do modelo gHMF é dado por

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^N [1 - \Delta \cos(\theta_i - \theta_j) - (1 - \Delta) \cos(q\theta_i - q\theta_j)], \quad (3.1)$$

onde  $q \in \mathbb{N}$  e  $\Delta \in [0,1]$ . O modelo é uma versão de longo alcance/campo médio dos modelos estudados nas referências [31, 32]. Considerando as partículas como um conjunto de spins, o novo acoplamento nemático introduzido,  $\cos(q\theta_i - q\theta_j)$ , favorece outros alinhamentos entre os spins, dependendo do valor de  $q$ . Por exemplo, para  $q = 2$ , favorece um alinhamento antiparalelo, enquanto o acoplamento ferromagnético do termo  $\cos(\theta_i - \theta_j)$  induz um alinhamento paralelo. O peso de cada acoplamento é controlado pelo parâmetro  $\Delta$  — quanto maior for o valor de  $\Delta$ , mais peso terá o termo ferromagnético, e vice-versa.

Notamos que tanto para  $q = 1$  quanto para  $\Delta = 1$ , o gHMF é igual ao modelo HMF. Devido ao parâmetro  $\Delta$ , o modelo gHMF tem um diagrama de fase mais complexo que o HMF, o que o torna ideal para estudar transições de fase de modelos com interações de longo alcance.

Os parâmetros de ordem são as magnetizações

$$M_1 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \cos \theta \quad (3.2)$$

e

$$M_q = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \cos(q\theta). \quad (3.3)$$

A definição das magnetizações tem apenas o termo de cossenos pois consideramos distribuições simétricas em  $\theta$  e um referencial onde  $\langle \sin \theta \rangle = 0$ .

Expandindo o hamiltoniano da equação (3.1) de maneira equivalente ao descrito na seção 2.1 para o modelo HMF, temos

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2} - \frac{1}{2N} \Delta \left( \sum_{i=1}^N \cos \theta_i \right)^2 - \frac{1}{2N} (1 - \Delta) \left( \sum_{i=1}^N \cos(q\theta_i) \right)^2,$$

a energia média por partícula,

$$\varepsilon = \frac{\langle p^2 \rangle}{2} + \frac{1 - \Delta M_1^2 - (1 - \Delta) M_q^2}{2}, \quad (3.4)$$

e a energia de uma partícula

$$\varepsilon(\theta, p) = \frac{p^2}{2} + 1 - \Delta M_1 \cos \theta - (1 - \Delta) M_q \cos(q\theta). \quad (3.5)$$

## 3.2 Mecânica Estatística de Equilíbrio

O procedimento para obter as soluções de equilíbrio no ensemble microcanônico é o mesmo usado para o modelo HMF na seção 2.2. Partimos diretamente da equação (2.22), válida para qualquer hamiltoniano no qual a energia cinética é da forma  $\sum p^2/2$ . Para determinar a expressão completa da entropia, calculamos a contribuição configuracional,  $s_{conf}$ . Novamente substituímos  $s_{conf} = \ln \Omega_{conf}/N$  por  $s_{conf} = \ln \Omega_M/N$ , pois as contribuições de  $\Omega_M$  e  $\Omega_{conf}$  para a entropia diferem apenas por uma constante de proporcionalidade. Para o modelo gHMF, a superfície  $\Omega_M$  é dada por

$$\Omega_M(M_1, M_q) = \int_{-\pi}^{\pi} \prod d\theta_i \delta \left( \sum \cos \theta_i - N M_1 \right) \delta \left( \sum \cos q\theta_i - N M_q \right), \quad (3.6)$$

ou, usando a representação de Fourier da delta de Dirac,

$$\Omega_M(M_1, M_q) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp \left\{ N [-ixM_1 - iyM_q + \ln \left( \int d\theta \exp(ix \cos \theta + iy \cos q\theta) \right)] \right\}. \quad (3.7)$$

Usando o método de ponto de sela e substituindo  $a = ix$  e  $b = iy$ , as condições para o ponto extremo  $(a, b)$  são

$$M_1 = \frac{\int d\theta \cos \theta \exp [a \cos \theta + b \cos q\theta]}{\int d\theta \exp [a \cos \theta + b \cos q\theta]} \quad (3.8)$$

e

$$M_q = \frac{\int d\theta \cos q\theta \exp [a \cos \theta + b \cos q\theta]}{\int d\theta \exp [a \cos \theta + b \cos q\theta]}. \quad (3.9)$$

Então, a contribuição configuracional para a entropia,  $s_{conf} = \frac{1}{N} \ln \Omega_M(M_1, M_q)$ , é dada por

$$s_{conf} = -M_1 a(M_1, M_q) - M_q b(M_1, M_q) + \ln \left( \int d\theta \exp [a(M_1, M_q) \cos \theta + b(M_1, M_q) \cos q\theta] \right), \quad (3.10)$$

e a entropia microcanônica é

$$s(\varepsilon) = \frac{1}{2} \ln 2\pi + \frac{1}{2} + \sup_{M_1, M_q} \left[ \frac{1}{2} \ln (2\varepsilon - 1 + \Delta M_1^2 + (1 - \Delta) M_q^2) - M_1 a(M_1, M_q) - M_q b(M_1, M_q) + \ln \left( \int d\theta \exp [a(M_1, M_q) \cos \theta + b(M_1, M_q) \cos q\theta] \right) \right]. \quad (3.11)$$

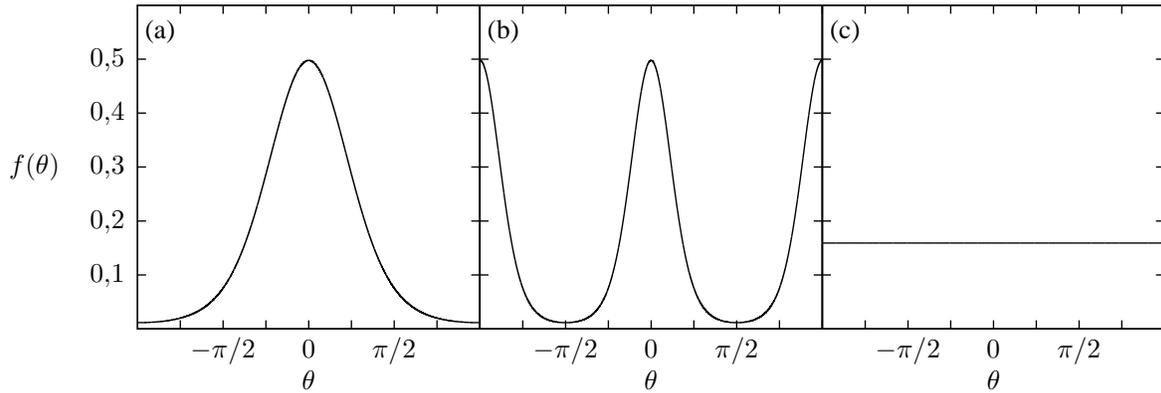
A maximização em  $(M_1, M_q)$  leva à solução de equilíbrio para as magnetizações,

$$\frac{\Delta M_1^*}{2\varepsilon - 1 + \Delta M_1^{*2} + (1 - \Delta) M_q^{*2}} = a(M_1^*, M_q^*) \quad (3.12)$$

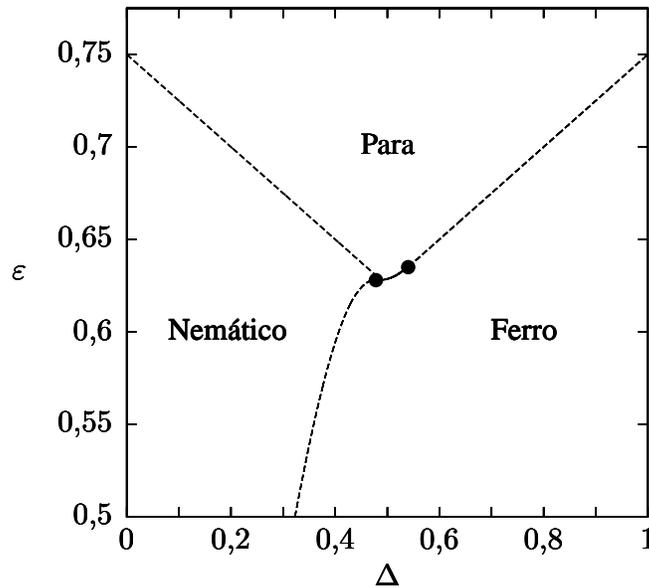
e

$$\frac{(1 - \Delta) M_q^*}{2\varepsilon - 1 + \Delta M_1^{*2} + (1 - \Delta) M_q^{*2}} = b(M_1^*, M_q^*). \quad (3.13)$$

A solução do conjunto de equações (3.8), (3.9), (3.12) e (3.13) determina as magnetizações de equilíbrio, dados  $\varepsilon$ ,  $q$  e  $\Delta$ . Elas podem ser classificadas em três tipos, ou fases, ilustradas na figura 3.1 através das distribuições angulares  $f(\theta)$ : (a) a fase ferromagnética



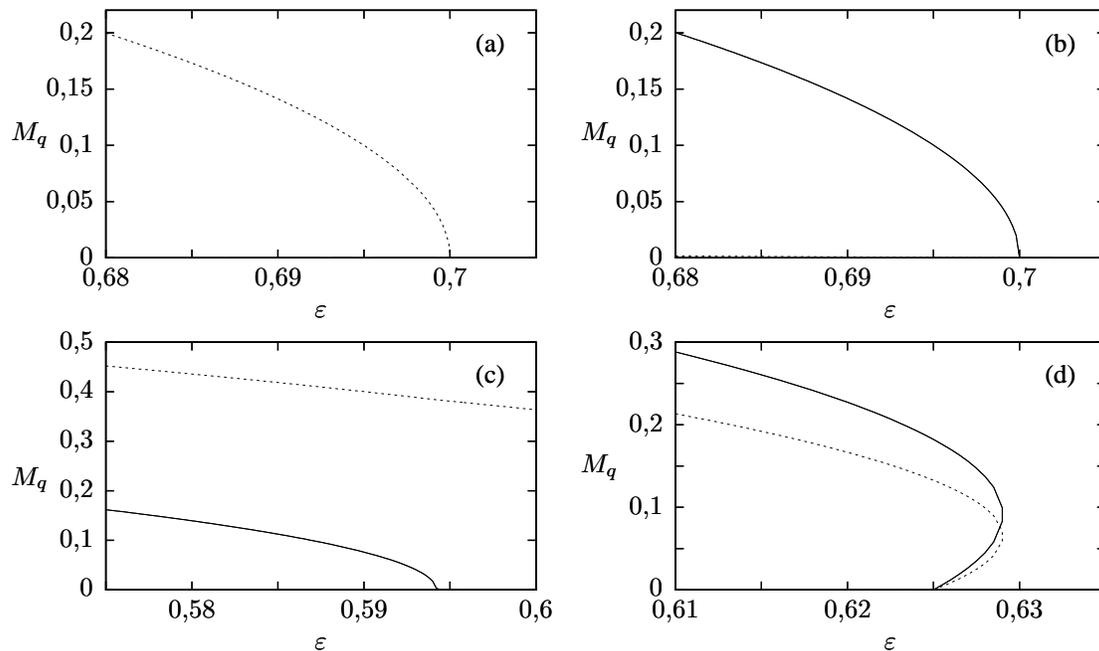
**Fig. 3.1:** Distribuições angulares de equilíbrio (Maxwell-Boltzmann) das três fases do modelo com  $q = 2$ : (a) ferromagnética ( $|M_1| > |M_2| \geq 0$ ), (b) nemática ( $|M_2| > |M_1| \geq 0$ ) e (c) paramagnética ( $M_1 = M_2 = 0$ ).



**Fig. 3.2:** Diagrama de fase de equilíbrio do ensemble microcanônico para  $q = 2$ . As transições são de segunda ordem (linhas tracejadas), exceto numa pequena região central, entre dois pontos tricríticos (círculos sólidos), na qual a transição é de primeira ordem (linha sólida).

( $|M_1| > |M_q| \geq 0$ ), (b) a fase nemática ( $|M_q| > |M_1| \geq 0$ ) e (c) a fase paramagnética ( $M_1 = M_q = 0$ ).

A figura 3.2 mostra o diagrama de fase resultante dessas soluções para  $q = 2$ , que foi o valor de  $q$  utilizado no presente trabalho. Todas as transições são de segunda ordem (linha tracejada), exceto por uma pequena região próxima a  $\Delta = 0,5$ , em que a transição é de primeira ordem (linha sólida). Os perfis das magnetizações  $M_1$  (linha sólida) e  $M_2$  (linha pontilhada) em função da energia, para quatro valores de  $\Delta$ , são exibidos na figura 3.3. Nos painéis (a), (b) e (c), que ilustram as transições nemática-paramagnética, ferromagnética-paramagnética e ferromagnética-nemática, respectivamente, há apenas uma solução ( $M_1, M_2$ ) abaixo da energia crítica<sup>1</sup>. Entretanto, no painel (d), que também mostra uma transição ferromagnética-paramagnética, existe um intervalo em torno da energia crítica em que existem duas soluções, caracterizando uma transição de primeira ordem. Nesse caso, a energia crítica é determinada pelo ponto onde as entropias da solução ferromagnética da paramagnética são iguais.



**Fig. 3.3:**  $M_1$  (linha sólida) e  $M_2$  (linha pontilhada) de equilíbrio em função da energia média  $\varepsilon$  ao longo da transição (a) nemática-paramagnética ( $\Delta = 0,2$ ), (b) ferromagnética-paramagnética de 2<sup>a</sup> ordem ( $\Delta = 0,8$ ), (c) ferromagnética-nemática ( $\Delta = 0,4$ ) e (d) ferromagnética-paramagnética de 1<sup>a</sup> ordem ( $\Delta = 0,5$ ).

<sup>1</sup> Além da paramagnética, que é solução para qualquer valor de  $\varepsilon$ , porém estável apenas para energias maiores que a crítica.

### 3.3 Estados de não-equilíbrio

Conforme apresentado anteriormente na seção 2.3, a relaxação de sistemas de longo alcance ocorre em duas etapas: primeiro, uma relaxação não-colisional para um estado quasi-estacionário, no regime da dinâmica de Vlasov; depois, a relaxação para o equilíbrio termodinâmico. Formalmente, este último ocorre apenas se o limite  $t \rightarrow \infty$  for tomado antes do limite  $N \rightarrow \infty$ , ou se  $N$  for finito. Caso contrário, o tempo de duração do estado quasi-estacionário divergirá, pois ele cresce com  $N^\gamma$ , onde  $\gamma$  depende do tipo de sistema sendo considerado [9, 11].

Ao contrário do estado de equilíbrio, o estado estacionário de não-equilíbrio depende das condições iniciais do sistema, como a magnetização. Analisaremos o caso inicialmente homogêneo em  $\theta$ , ou seja, com magnetização inicial nula ( $M_1 = M_2 = 0$ ).

#### 3.3.1 Dinâmica molecular

Como distribuição inicial, foi usada uma distribuição tipo water-bag, homogênea em  $\theta$ ,

$$f_0(\theta, p) = \frac{1}{4\pi p_m} \Theta(\pi - |\theta|) \Theta(p_m - |p|). \quad (3.14)$$

Na simulação numérica,  $N$  partículas são distribuídas no intervalo  $(-\pi, -p_m) \leq (\theta_i, p_i) \leq (\pi, p_m)$ , onde  $(\theta_i, p_i)$  é a posição e o momentum da  $i$ -ésima partícula. A equação de movimento de Hamilton é

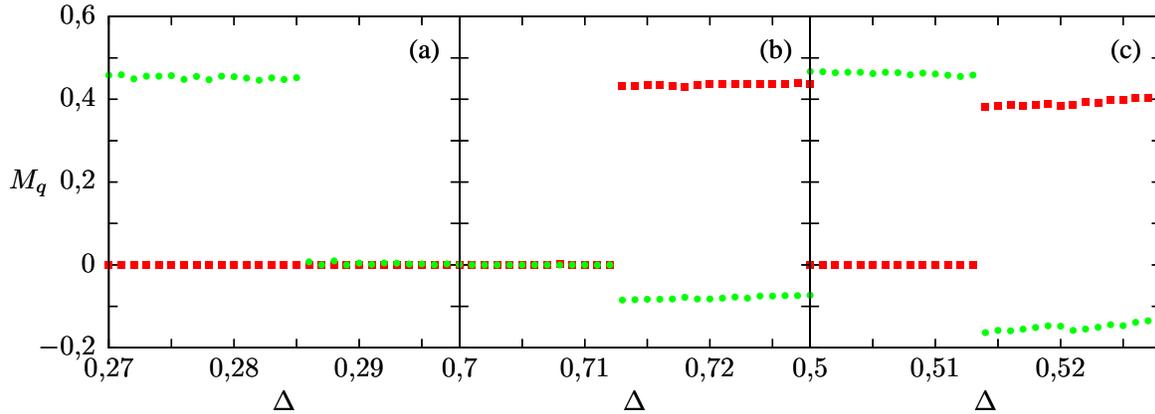
$$\ddot{\theta}_i = -\frac{\partial H}{\partial \theta_i} = -\Delta M_1(t) \sin \theta_i - 2(1 - \Delta) M_2(t) \sin(2\theta_i). \quad (3.15)$$

Os parâmetros de interesse nesse trabalho são a energia média,  $\varepsilon$ , e  $\Delta$ , que são fixos em cada simulação. Para a distribuição dada pela equação (3.14),  $M_1 = M_2 = 0$  e  $\varepsilon = \langle p^2 \rangle / 2 + 1/2$ . A última expressão é suficiente para determinar  $p_m$ , pois  $\langle p^2 \rangle = p_m^2 / 3 = 2\varepsilon - 1$ , e assim temos que

$$p_m = \sqrt{3(2\varepsilon - 1)}. \quad (3.16)$$

O integrador e a precisão numérica foram iguais aos usados no modelo HMF (para mais detalhes, ver seção 2.3.1).

Simulando a dinâmica do sistema, ele rapidamente atinge um estado no qual  $M_1$  e  $M_2$  oscilam em torno de seus valores estacionários. Assim como no equilíbrio, esses valores dependem dos parâmetros  $\varepsilon$  e  $\Delta$ . Escolhemos alguns valores de  $\varepsilon$  e, para cada um deles, fizemos uma sequência de simulações variando  $\Delta$  para determinar onde ocorrem as



**Fig. 3.4:** *Transições de fase de não-equilíbrio no modelo gHMF. Os símbolos representam os valores das magnetizações estacionárias  $M_1$  (quadrados sólidos) e  $M_2$  (círculos) em função do parâmetro  $\Delta$ , obtidos através de simulação computacional da dinâmica de  $N = 2 \times 10^6$  partículas. Cada painel mostra um tipo de transição: (a) paramagnética-nemática ( $\varepsilon = 0,56$ ), (b) paramagnética-ferromagnética ( $\varepsilon = 0,56$ ) e (c) nemática-ferromagnética ( $\varepsilon = 0,54$ ).*

transições de fase. Três resultados estão ilustrados na figura 3.4, que mostra os valores estacionários de  $M_1$  e  $M_2$  em função de  $\Delta$ . Cada painel apresenta uma das três possíveis transições, todas de primeira ordem: (a) paramagnética-nemática, para a energia  $\varepsilon = 0,56$ ; (b) paramagnética-ferromagnética, com  $\varepsilon = 0,56$ ; e (c) nemática-ferromagnética em  $\varepsilon = 0,54$ . As duas primeiras têm mesma energia  $\varepsilon$ , porém ocorrem em diferentes intervalos de  $\Delta$ . Todas ocorrem em pontos diferentes daqueles previstos pela mecânica estatística de equilíbrio. Como estamos tratando de um sistema de interações com longo alcance, os primeiros estados estacionários atingidos não são de equilíbrio termodinâmico, e necessitamos de outra maneira para determinar as linhas de transição de fase.

### 3.3.2 Estabilidade do estado homogêneo

No limite  $N \rightarrow \infty$ , a dinâmica do sistema é descrita exatamente pela equação de Vlasov (equação (2.42)) [8]. O estado inicial que consideramos — uma distribuição homogênea em  $\theta$  — é solução de Vlasov, pois como  $M_1(t=0) = M_2(t=0) = 0$ , ela depende apenas de  $p$ . Portanto, uma transição entre o estado homogêneo e um estado não-homogêneo, seja nemático ou ferromagnético, depende do surgimento de uma instabilidade dinâmica.

Usaremos um método perturbativo para estudar a estabilidade desse modelo. Reescrevemos o limite em  $p$  da distribuição,  $p_m$ , como

$$p_m(t) = p_0 + \sum_{k=0}^{\infty} A_k(t) \cos(k\theta), \quad (3.17)$$

com  $p_0$  dado pela equação (3.16). Definimos a magnetização generalizada como

$$\begin{aligned} M_n(t) &= \eta \int_{-\infty}^{\infty} dp \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \cos(n\theta) \Theta(p_m(t) - |p|) \Theta(\pi - |\theta|) \\ &= 2\eta \int_{-\pi}^{\pi} d\theta p_m(t) \cos(n\theta) \\ &= 2\eta \int_{-\pi}^{\pi} d\theta p_0 \cos(n\theta) + 2\eta \sum_{m=0}^{\infty} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta A_m(t) \cos(m\theta) \cos(n\theta) \\ &= 2\pi\eta A_n(t) \\ &= \frac{A_n(t)}{2p_0}, \end{aligned} \quad (3.18)$$

onde usamos  $\eta = 1/4\pi p_0$ . Derivando o termo  $\langle \cos(n\theta) \rangle$  duas vezes em relação ao tempo, obtemos a equação de movimento

$$\ddot{M}_n(t) = -n \langle F(\theta) \sin(n\theta) \rangle - n^2 \langle p^2 \cos(n\theta) \rangle. \quad (3.19)$$

Os valores médios são calculados usando a função distribuição  $f(\theta, p, t) = \eta \Theta(p_m(t) - |p|) \Theta(\pi - |\theta|)$ . Sendo assim, a integral da expressão acima envolve uma série infinita de cossenos. Para nossa análise, consideramos a série até  $k = 4$ , que mostrou-se suficiente para determinarmos as transições de fase. Integrando, encontramos o sistema de equações

$$\ddot{M}_1 + \left( \frac{12\varepsilon - 6 - \Delta}{2} \right) M_1 = f_1(M_1, M_2, M_3, M_4) \quad (3.20)$$

$$\ddot{M}_2 + 2(12\varepsilon + \Delta - 7) M_2 = f_2(M_1, M_2, M_3, M_4) \quad (3.21)$$

$$\ddot{M}_3 + 27(2\varepsilon - 1) M_3 = f_3(M_1, M_2, M_3, M_4) \quad (3.22)$$

$$\ddot{M}_4 + 48(2\varepsilon - 1) M_4 = f_4(M_1, M_2, M_3, M_4), \quad (3.23)$$

onde

$$f_1 = M_1 M_2 \left(1 - \frac{3\Delta}{2}\right) + (\Delta - 1) M_2 M_3 - 3(2\varepsilon - 1) \{M_1^3 + M_1^2 M_3 + M_3 [M_2 (2 + M_2) + 2(1 + M_2) M_4] + 2 M_1 [M_2 + M_2^2 + M_3^2 + M_2 M_4 + M_4^2]\}, \quad (3.24)$$

$$f_2 = \Delta (M_1^2 - M_1 M_3 + 2 M_2 M_4) - 2 M_2 M_4 - 12(2\varepsilon - 1) [M_2^3 + M_3^2 M_4 + 2 M_1 M_3 (1 + M_2 + M_4) + M_1^2 (1 + 2 M_2 + M_4) + 2 M_2 (M_3^2 + M_4 + M_4^2)], \quad (3.25)$$

$$f_3 = \frac{3 M_1}{2} [(2 - \Delta) M_2 - \Delta M_4] - 9(2\varepsilon - 1) \{M_1^3 + 6 M_1^2 M_3 + 3 M_1 [M_2 (2 + M_2) + 2(1 + M_2) M_4] + 3 M_3 [M_2^2 + 2(M_2^2 + M_2 M_4 + M_4^2)]\} \quad (3.26)$$

e

$$f_4 = 2\Delta M_1 M_3 - 4(\Delta - 1)M_2^2 - 48(2\varepsilon - 1) [2 M_1 (1 + M_2) M_3 + M_2 (M_2 + M_3^2) + 2(M_2^2 + M_3^2) M_4 + M_4^3 + M_1^2 (M_2 + 2M_4)]. \quad (3.27)$$

Essas equações estão escritas de forma a separar os termos lineares no lado esquerdo e os não-lineares no lado direito da igualdade. Para determinarmos as energias críticas das transições paramagnética-ferromagnética e paramagnética-nemática, primeiramente analisamos a estabilidade linear das soluções para  $M_1(t)$  e  $M_2(t)$ . Desconsiderando as contribuições não-lineares das equações (3.24)–(3.27), as equações (3.20) e (3.21) têm a forma  $\ddot{M}_{1,2} = -\kappa_{1,2} M_{1,2}$ , cuja solução é dada por termos proporcionais à  $\exp(\pm i\sqrt{\kappa_{1,2}} M_{1,2})$  e é estável apenas para  $\kappa_{1,2} \geq 0$ . Caso contrário ( $\kappa_{1,2} < 0$ ), os expoentes serão reais e haverá crescimento exponencial. O estado paramagnético  $M_1 = 0, M_2 = 0$  deve ser estável apenas para  $\kappa_1 \geq 0, \kappa_2 \geq 0$ ; logo, as linhas críticas que separam a fase paramagnética das fases ferromagnéticas e nemáticas são determinadas pela condição  $\kappa_1 = 0$  e  $\kappa_2 = 0$ , respectivamente. De acordo com as equações diferenciais para  $M_1(t)$  e  $M_2(t)$ , dadas por (3.20) e (3.21),  $\kappa_1 = (12\varepsilon - 6 - \Delta)/2$  e  $\kappa_2 = 2(12\varepsilon + \Delta - 7) = 0$ . Dessa forma, temos que

$$\varepsilon_c^{pf}(\Delta) = \frac{6 + \Delta}{12} \quad (3.28)$$

e

$$\varepsilon_c^{pn}(\Delta) = \frac{7 - \Delta}{12}, \quad (3.29)$$

onde  $\varepsilon_c^{pf}$  e  $\varepsilon_c^{pn}$  são as energias críticas das transições paramagnética-ferromagnética e paramagnética-nemática, respectivamente.

Para determinar a ordem da transição, não basta usar apenas a análise de instabilidade linear. Todo o sistema de equações (3.20)–(3.23), incluindo os termos não-lineares dados

$\Delta$	Teoria		Simulação	
	$M_1$	$M_2$	$M_1$	$M_2$
$< 0,5$	0,0	0,459	0,0	0,450
0,6	0,5102	-0,1861	0,41	-0,10
1,0	0,5554	-0,1129	0,45	-0,07

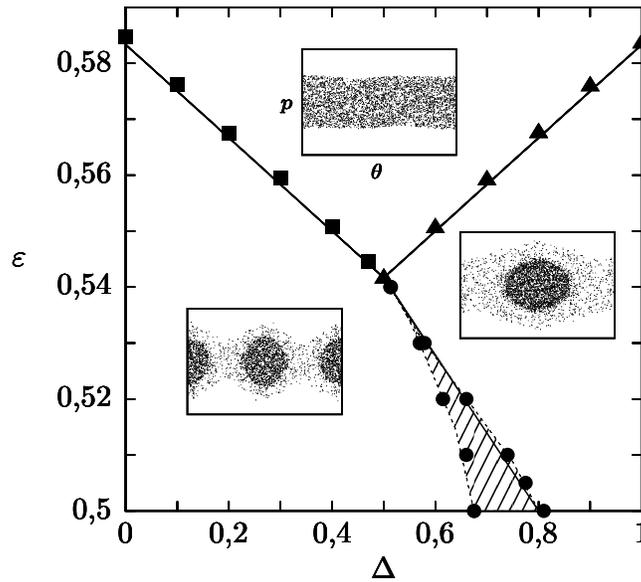
**Tab. 3.1:** *Valores obtidos pelos pontos fixos das equações (3.20)–(3.23) e por simulação computacional (dinâmica molecular) dos intervalos em  $M_1$  e  $M_2$  na transição paramagnética-nemática (primeira fileira) e na paramagnética-ferromagnética (segunda e terceira fileiras).*

por (3.24)–(3.27), deve ser resolvido. Os pontos fixos do sistema são calculados igualando os termos  $\ddot{M}_n(t) = 0$ . Na transição paramagnética-nemática, o valor de  $M_2$  varia de zero para aproximadamente 0,459 descontinuamente e  $M_1$  permanece nulo. Na transição paramagnética-ferromagnética, as duas magnetizações passam de zero para um valor finito que depende de  $\Delta$ . A tabela 3.1 mostra na segunda e terceira coluna os valores dos saltos em  $M_1$  e  $M_2$  para  $\Delta < 0,5$ , onde ocorre a transição para-nemática, e para dois valores de  $\Delta > 0,5$ , nos quais há transição para-ferro. As duas colunas à direita exibem os valores medidos através de dinâmica molecular de  $N = 10^6$  partículas. O valor de  $M_2$  da transição para-nemática obtido pela análise de instabilidade não-linear é muito próximo do resultado da dinâmica molecular, sendo eles 0,459 e 0,450, respectivamente. Essa análise também reproduz qualitativamente a natureza da transição para-ferro, de primeira ordem e sempre com  $M_1$  e  $M_2$  de sinais opostos, embora os valores quantitativos não sejam tão próximos.

A transição nemático-ferromagnético é determinada pelas taxas de crescimento ( $\sqrt{\kappa}$ ) de  $M_1(t)$  e  $M_2(t)$ , pois ambas as soluções (nemática e ferromagnética) são possíveis. Quando  $M_1$  crescer mais rapidamente que  $M_2$ , o sistema atingirá primeiro a fase ferromagnética e permanecerá nela, e se a taxa de crescimento de  $M_2$  for maior que a de  $M_1$ , a fase atingida será a nemática. Portanto, a transição ocorre quando  $(12\varepsilon - 6 - \Delta)/2 = 2(12\varepsilon - 7 + \Delta)$ , ou seja, a energia crítica da transição nemática-ferro é dada por

$$\varepsilon_c^{nf} = (22 - 5\Delta)/36. \quad (3.30)$$

As equações (3.28), (3.29) e (3.30) determinam o diagrama de fase de todas as possíveis transições entre estados homogêneos e não-homogêneos do sistema gHMF com  $q = 2$ . Como pode ser visto na figura 3.5, esse diagrama, previsto pelas instabilidades do estado



**Fig. 3.5:** Diagrama de fase dos estados fora-de-equilíbrio do modelo gHMF ( $q = 2$ ). As linhas são as transições previstas pela teoria perturbativa. Os quadrados e triângulos são resultados de dinâmica molecular e marcam pontos de transição paramagnética-nemática e paramagnética-ferromagnética, respectivamente. Os círculos sólidos demarcam os limites da região de transição nemática-ferromagnética. A região listrada, entre os círculos, é uma região de instabilidade, onde as simulações numéricas levaram tanto à fase nemática quanto à ferromagnética. As três figuras internas mostram o espaço de fase da dinâmica molecular, para cada fase.

homogêneo, coincide com o obtido pela dinâmica molecular descrita na subseção 3.3.1. A figura também mostra uma região onde as simulações computacionais resultaram tanto em estados nemáticos quanto em ferromagnéticos. Nessa região, em algumas simulações observamos que o sistema relaxou inicialmente para uma configuração nemática, e após um intervalo de tempo, as oscilações das magnetizações aumentaram e o estado ferromagnético foi atingido. Mesmo com essa instabilidade, a linha definida pela equação (3.30) demarca bem o limite entre essa região e a região puramente ferromagnética.

Assim como no modelo HMF, se simularmos a evolução de um sistema por tempo suficiente, eventualmente ele relaxará para uma distribuição tipo Maxwell-Boltzmann. O diagrama de fase resultante deverá ter a forma da figura 3.2. Porém, no limite termod-

inâmico  $N \rightarrow \infty$ , essa relaxação nunca ocorrerá, e o diagrama de fase do estado final do sistema será o da figura 3.5. Embora os dois diagramas sejam no plano  $(\Delta, \varepsilon)$ , eles são inequivalentes. Todas as transições de não-equilíbrio são de primeira ordem, enquanto as de equilíbrio são majoritariamente de segunda ordem. As escalas de energia são diferentes: para energias acima de  $\varepsilon \sim 0,583$ , os estados quasi-estacionários fora de equilíbrio são paramagnéticos para qualquer valor de  $\Delta$ , enquanto no equilíbrio, a menor energia possível para o estado paramagnético é  $\varepsilon \sim 0,63$ .

Para finalizar este capítulo, notamos que a abordagem do modelo gHMF apresentada aqui envolveu apenas uma possível configuração deste modelo. Ainda há aspectos que podem ser analisados em trabalhos futuros; por exemplo, outros valores de  $q$  podem resultar em diagramas de fase mais ricos, com outras fases. Além disso, o diagrama de fase deve depender da magnetização inicial, como ocorre no modelo HMF. Outros estados iniciais, além do estado homogêneo estudado aqui, podem acrescentar ao estudo das transições de fase fora de equilíbrio. Finalmente, no âmbito da mecânica estatística de equilíbrio, o estudo de outros ensembles poderá mostrar inequivalência entre ensembles nas regiões de transição de fase.

## Capítulo 4

# Conclusões

O trabalho apresentado nessa dissertação consiste no estudo da relaxação para estados estacionários de sistemas de partículas que interagem por meio de forças de longo alcance. Na introdução, apresentei uma motivação para esse estudo, citando sistemas reais de longo alcance como galáxias e plasmas não-neutros, além de explicar alguns conceitos que diferenciam esses sistemas de sistemas com interações de curto alcance. Os dois capítulos seguintes expuseram o estudo de dois modelos de longo alcance: o HMF (Hamiltonian Mean Field), um modelo paradigmático da área, e o gHMF (generalized Hamiltonian Mean Field), uma versão de longo alcance do modelo estudado nas referências [31, 32]. No presente capítulo, resumo os conceitos da introdução e os resultados expostos nos dois capítulos anteriores.

A relaxação em sistemas com interações de longo alcance procede em duas etapas: a primeira, não-colisional, regida pela equação de Vlasov, que leva a uma distribuição estacionária que não é necessariamente a de Maxwell-Boltzmann, e a segunda, colisional, em que as correlações entre partículas relaxam o sistema para o equilíbrio térmico (Maxwell-Boltzmann). Devido ao escalonamento do potencial com o inverso do número de partículas  $N$ , a contribuição das correlações para a evolução da função distribuição também é inversamente proporcional à  $N$  [2]. Quanto mais próximo o sistema estiver do limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ), maior o tempo necessário para que as correlações levem a distribuição ao equilíbrio. Em função disso, o tempo de vida dos estados quasi-estacionários diverge com  $N$ . Esses estados, ao contrário dos estados de equilíbrio termodinâmico, dependem das condições iniciais do sistema, pois a dinâmica inicial pode gerar ressonâncias que determinam a formação de estruturas tipo núcleo-halo [7].

O primeiro modelo estudado durante meu mestrado foi o modelo HMF. Ele é um modelo simples, apresentado em 1995 por Antoni e Ruffo [20], e muito utilizado como modelo geral para estudar propriedades de sistemas de longo alcance (por exemplo, nas referências

[10, 33, 9, 34, 2], entre outras). Em 2011, Yan Levin e Renato Pakter aplicaram uma teoria desenvolvida por eles para outros sistemas de longo alcance [14, 11], a teoria núcleo-halo, ao modelo HMF. Essa teoria é baseada na dinâmica de Vlasov e em ressonâncias paramétricas, fundamentada na ideia que a dinâmica inicial do sistema determina as características da distribuição estacionária final. Oscilações transferem energia para partículas ressonantes, que por sua vez passam a ocupar regiões de alta energia no espaço de fase. O amortecimento das oscilações suprime o mecanismo de transferência de energia, e o sistema permanece em uma configuração caracterizada por um núcleo denso de baixa energia cercado por um halo pouco denso de alta energia. Usando sua teoria, Levin e Pakter obtiveram boas previsões a respeito da transição de fase do modelo HMF, inclusive mostrando uma transição de primeira ordem onde anteriormente era prevista uma transição de segunda ordem [29].

A previsão da transição de segunda ordem foi obtida usando a teoria de relaxação violenta de Lynden-Bell [12]. Ela é baseada em uma discretização do espaço de fase em macro e microcélulas e, através de um procedimento combinatório de contagem das microcélulas ocupadas, define uma entropia para a distribuição estacionária macroscópica (na escala das macrocélulas). Essa teoria, no entanto, não leva em consideração possíveis ressonâncias e não consegue descrever a formação de halo. Pela natureza da entropia de relaxação violenta, baseada em um processo de contagem, ela necessita que a distribuição seja ergódica e que haja boa mistura no espaço de fase. Logo, ela só deve funcionar quando o sistema não apresentar oscilações, pois quando houver, haverá separação de núcleo e halo e a ergodicidade será quebrada.

Para descrever as oscilações coletivas do sistema, deduzimos uma equação de movimento que retrata as oscilações do envelope, definido como o limite em  $\theta$  da distribuição inicial tipo water-bag. Usando o conceito de equação de envelope, desenvolvemos uma condição para determinar quando não haverá oscilações e ressonâncias. Essa condição define uma curva no espaço de parâmetros  $(\varepsilon, M_0)$ , que chamamos de Curva Virial Generalizada (CVG), em analogia com a condição virial. Mostramos por comparação com simulações numéricas que condições iniciais que obedecem a essa condição levam à distribuições que são bem descritas pela teoria de relaxação violenta, enquanto fora dela há formação de halo. Para localizar as ressonâncias, usamos partículas teste que interagem com a distribuição oscilatória descrita pela equação de envelope. As seções de Poincaré obtidas mostram ressonâncias na mesma região do espaço de fase onde há formação de halo na dinâmica molecular (para condições fora da CVG) e uma dinâmica regular, sem ressonâncias, para condições sobre a CVG.

Assim, obtivemos uma teoria que é capaz de determinar qualitativamente as características da dinâmica, prevendo as condições nas quais haverá ressonância e quebra de ergodicidade, sem precisar resolver explicitamente a equação de Vlasov nem simular a dinâmica completa de  $N$  corpos. Fora da CVG, a teoria núcleo-halo é mais adequada para descrever essas mesmas distribuições; porém, devido à não-periodicidade da equação de envelope, ainda não temos um método satisfatório para determinar a energia do halo.

O terceiro capítulo descreve o segundo modelo estudado, o modelo gHMF. É semelhante ao modelo HMF, porém com acoplamento nemático além do acoplamento ferromagnético. A pesquisa abordou os diagramas de fase de equilíbrio e de não-equilíbrio, que mostramos serem inequivalentes. Usando simulação numérica, determinamos a fase (paramagnética, ferromagnética ou nemática) do estado quasi-estacionário para diferentes condições iniciais, e assim construímos um diagrama de fase de dinâmica molecular. Em seguida, apresentamos uma teoria baseada nas instabilidades do estado inicial homogêneo. Ela prevê corretamente a ordem e a localização das transições desse diagrama de fase de não-equilíbrio, onde tanto a ordem quanto a localização dessas transições diferem do diagrama de fase de equilíbrio.

Esses dois trabalhos resultaram em dois artigos: o do modelo HMF, publicado em abril de 2012 [7], e o do modelo gHMF, aceito em novembro de 2012 para publicação [35]. Esses artigos, no entanto, de forma alguma esgotaram os assuntos a serem abordadas nos dois modelos. Ainda há áreas a serem exploradas, como a evolução dos sistemas a partir de outras distribuições iniciais além da water-bag e a descoberta de uma maneira satisfatória de determinar todos os parâmetros necessários para a teoria núcleo-halo mesmo no caso do não-confinamento das partículas dentro do potencial. Em relação ao equilíbrio termodinâmico, também podemos aprofundar o estudo do modelo gHMF para incluir o ensemble canônico, analisando as possíveis inequivalências entre ensembles. Essas questões no momento permanecem como perspectivas para futuros estudos na área da estatística de sistemas com interações de longo alcance.



# Referências Bibliográficas

- [1] H. B. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. John Wiley & Sons, 2a ed., 1985.
- [2] A. Campa, T. Dauxois e S. Ruffo, “Statistical mechanics and dynamics of solvable models with long-range interactions,” *Physics Reports*, vol. 480, pp. 57–159, Set. 2009.
- [3] M. Kac, “On the Partition Function of a One-Dimensional Gas,” *Physics of Fluids*, vol. 2, no. 1, pp. 8–12, 1959.
- [4] K. Huang, *Statistical Mechanics*. John Wiley & Sons, 2a ed., 1987.
- [5] L. Reichl, *A Modern Course In Statistical Physics*. Wiley-Interscience, 2a ed., 1998.
- [6] D. Mukamel, S. Ruffo, e N. Schreiber, “Breaking of Ergodicity and Long Relaxation Times in Systems with Long-Range Interactions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, p. 240604, Dez. 2005.
- [7] F. P. da C. Benetti, T. N. Teles, R. Pakter e Y. Levin, “Ergodicity Breaking and Parametric Resonances in Systems with Long-Range Interactions,” *Physical Review Letters*, vol. 108, p. 140601, Abr. 2012.
- [8] W. Braun e K. Hepp, “The Vlasov dynamics and its fluctuations in the  $1/N$  limit of interacting classical particles,” *Communications in Mathematical Physics*, vol. 56, pp. 101–113, Jun. 1977.
- [9] Y. Yamaguchi, J. Barré, F. Bouchet, T. Dauxois, e S. Ruffo, “Stability criteria of the Vlasov equation and quasi-stationary states of the HMF model,” *Physica A: Statistical and Theoretical Physics*, vol. 337, no. 1-2, pp. 36–66, 2004.

- 
- [10] A. Antoniazzi, F. Califano, D. Fanelli e S. Ruffo, “Exploring the Thermodynamic Limit of Hamiltonian Models: Convergence to the Vlasov Equation,” *Physical Review Letters*, vol. 98, pp. 150602–1–150602–4, Abr. 2007.
- [11] T. N. Teles, Y. Levin, R. Pakter, e F. B. Rizzato, “Statistical mechanics of unbound two-dimensional self-gravitating systems,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2010, p. P05007, maio 2010.
- [12] D. Lynden-Bell, “Statistical mechanics of violent relaxation in stellar systems,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 136, pp. 101–121, 1967.
- [13] T. Padmanabhan, “Statistical mechanics of gravitating systems,” *Physics Reports*, vol. 188, pp. 285–362, abr 1990.
- [14] Y. Levin, R. Pakter, e F. Rizzato, “Collisionless relaxation in gravitational systems: From violent relaxation to gravothermal collapse,” *Physical Review E*, vol. 78, p. 021130, ago. 2008.
- [15] T. N. Teles, R. Pakter e Y. Levin, “Relaxation and emittance growth of a thermal charged-particle beam,” *Applied Physics Letters*, vol. 95, no. 17, p. 173501, 2009.
- [16] A. Venaille e F. Bouchet, “Statistical Ensemble Inequivalence and Bicritical Points for Two-Dimensional Flows and Geophysical Flows,” *Physical Review Letters*, vol. 102, p. 104501, mar. 2009.
- [17] S. Slama, G. Krenz, S. Bux, C. Zimmermann, e P. W. Courteille, “Collective Atomic Recoil Lasing and Superradiant Rayleigh Scattering in a high-Q ring cavity,” in *Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long-range Interaction: Theory and Experiments* (A. Campa, A. Giansanti, G. Morigi e F. S. Labini, ed.), vol. CP 970 of *Mathematical and Statistical Physics*, pp. 319–331, American Institute of Physics, American Institute of Physics, 2008.
- [18] T. N. Teles, Y. Levin e R. Pakter, “Statistical mechanics of 1D self-gravitating systems: the core-halo distribution,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 417, pp. L21–L25, 2011.
- [19] R. Pakter e Y. Levin, “Core-Halo Distribution in the Hamiltonian Mean-Field Model,” *Physical Review Letters*, vol. 106, p. 200603, maio 2011.

- [20] M. Antoni e S. Ruffo, “Clustering and relaxation in Hamiltonian long-range dynamics,” *Physical Review E*, vol. 52, pp. 2361–2374, set. 1995.
- [21] H. Yoshida, “Construction of higher order symplectic integrators,” *Physics Letters A*, vol. 150, pp. 262–268, nov 1990.
- [22] E. Hairer, “Fortran and Matlab Codes.” Website, 2004.
- [23] P.-H. Chavanis, “Lynden-Bell and Tsallis distributions for the HMF model,” *European Physical Journal B: Condensed Matter Physics*, vol. 53, pp. 487–501, nov. 2006.
- [24] G. Camm, “Self-gravitating star systems,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 110, p. 305, 1950.
- [25] M. Lecar, “A one-dimensional self-gravitating stellar gas,” in *The Theory of Orbits in the Solar System and in Stellar Systems. Proceedings from Symposium no. 25 held in Thessaloniki, 1964.* (G. I. Kontopoulos, ed.), p. 46, International Astronomical Union, Academic Press, 1966.
- [26] F. Hohl e M. R. Feix, “Numerical experiments with a one-dimensional model for a self-gravitating star system,” *Astrophysical Journal*, vol. 147, pp. 1164–1179, 1967.
- [27] P. Mineau, M. R. Feix e J. L. Rouet, “Numerical simulations of violent relaxation and formation of phase space holes in gravitational systems,” *Astronomy and Astrophysics*, vol. 228, pp. 344–349, fev. 1990.
- [28] A. Antoniazzi, D. Fanelli, J. Barré, P-H Chavanis, T. Dauxois, e S. Ruffo, “Maximum entropy principle explains the quasistationary states in systems with long-range interactions: The example of the Hamiltonian mean-field model,” *Physical Review E*, vol. 75, p. 011112, 2007.
- [29] A. Antoniazzi, D. Fanelli, S. Ruffo e Y. Y. Yamaguchi, “Nonequilibrium Tricritical Point in a System with Long-Range Interactions,” *Physical Review Letters*, vol. 99, pp. 2–5, jul. 2007.
- [30] Y. Levin, R. Pakter e T. N. Teles, “Collisionless Relaxation in Non-Neutral Plasmas,” *Physical Review Letters*, vol. 100, p. 040604, jan. 2008.

- 
- [31] D. H. Lee e G. Grinstein, “Strings in two-dimensional classical XY models,” *Physical Review Letters*, vol. 55, pp. 541–544, jul. 1985.
- [32] F. C. Poderoso, J. J. Arenzon e Y. Levin, “New Ordered Phases in a Class of Generalized XY Models,” *Physical Review Letters*, vol. 106, p. 067202, fev. 2011.
- [33] V. Latora, A. Rapisarda e S. Ruffo, “Lyapunov Instability and Finite Size Effects in a System with Long-Range Forces,” *Physical Review Letters*, vol. 80, pp. 692–695, jan. 1998.
- [34] J. Barré, F. Bouchet, T. Dauxois, S. Ruffo e Y. Y. Yamaguchi, “The Vlasov equation and the Hamiltonian mean-field model,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 365, pp. 177–183, jan. 2006.
- [35] T. N. Teles, F. P. da C. Benetti, R. Pakter e Y. Levin, “Nonequilibrium phase transitions in systems with long-range interactions,” *Physical Review Letters*, vol. 109, p. 230601, dez. 2012.