

Universidade Estadual de Campinas

Instituto de Física “Gleb Wataghin”

BANHOS CAÓTICOS FINITOS COMO RESERVATÓRIOS TÉRMICOS

Marcelo Amorim Marchiori

Orientador: Prof. Dr. Marcus Aloizio Martinez de Aguiar

Este exemplar corresponde à redação final da Tese de Doutorado defendida pelo aluno Marcelo Amorim Marchiori e aprovada pela comissão julgadora em 02 de setembro de 2011.



Prof. Dr. Marcus Aloizio Martinez de Aguiar

Tese de Doutorado apresentada ao Instituto de Física Gleb Wataghin da UNICAMP para obtenção do título de Doutor em Ciências.

Campinas, 2011

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA POR
VALKÍRIA SUCCI VICENTE – CRB8/5398 - BIBLIOTECA DO IFGW
UNICAMP**

M332b	<p>Marchiori, Marcelo Amorim, 1981- Banhos caóticos finitos como reservatórios térmicos / Marcelo Amorim Marchiori. -- Campinas, SP : [s.n.], 2011.</p> <p style="text-align: center;">Orientador: Marcus Aloizio Martinez de Aguiar. Tese (doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física “Gleb Wataghin”.</p> <p style="text-align: center;">1. Dissipação de energia. 2. Sistemas finitos. 3. Caos. 4. Reservatório térmico. I. Aguiar, Marcus Aloizio Martinez de, 1960- II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física “Gleb Wataghin”. III. Título.</p>
-------	--

Informações para Biblioteca Digital

Título em inglês: Finite chaotic environment as a thermal reservoir

Palavras-chave em inglês:

Energy dissipation

Finite systems

Chaos

Thermal reservoir

Área de Concentração: Física Geral

Titulação: Doutor em Ciências

Banca Examinadora:

Marcus Aloizio Martinez de Aguiar [Orientador]

Amir Ordacgi Caldeira

Kyoko Furuya

Marcus Werner Beims

Marcos Gomes Eleutério da Luz

Data da Defesa: 02-09-2011

Programa de Pós-Graduação em: Física



MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE **MARCELO AMORIM MARCHIORI - RA 049323**, APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA “GLEB WATAGHIN” DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 02/09/2011.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Marcus Aloizio Martinez de Aguiar – DFMC/IFGW/UNICAMP
(Orientador do Candidato)

Prof. Dr. Amir Ordacgi Caldeira – DFMC/IFGW/UNICAMP

Profa. Dra. Kyoko Furuya - DFMC/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Marcus Werner Beims – DF/UFPR

Prof. Dr. Marcos Gomes Eleutério da Luz – DF/UFPR

Dedico esta tese ao meu avô
José Marchiori Netto (*in memoriam*)
e aos meus pais,
Heloísio e Josiane.

Agradecimentos

Esta tese é, em grande parte, devida à generosidade de muitos daqueles com os quais convivi. Espero que estas palavras não limitem a imensa gratidão

ao Prof. Marcus A. M. de Aguiar, pelos anos de aprendizado, amizade e ciência;

ao Prof. Marcus V. S. Bonança e ao amigo Thiago F. Viscondi por terem, verdadeiramente, contribuído para a conclusão deste trabalho;

ao amigo Fábio Stucchi Vannucchi pela gentileza de ceder o manuscrito de sua monografia sobre o Teorema de Flutuação-Dissipação;

aos funcionários do DFMC e CPG, pelo apoio;

ao pessoal do Grupo de Sistemas Dinâmicos: Elisabeth Baptestini, Thiago Viscondi, Adriano Grigolo, Sabrina Araújo, Alexandre Ribeiro, Matheus Veronez, Wendell Barreto, Carolina Reigada, Lucas Dias e àqueles que, de alguma forma contribuíram para nossas reuniões semanais;

ao pessoal da sala de estudos do DFMC: Mateus Michelin, Eric Andrade, Rodrigo Freitas, André Cidrim, Felipe Santos, Pedro Leopoldo, Vitor Quito e todos os demais que por lá passaram;

à minha esposa, Gláucia, pelo amor, carinho e dedicação;

aos meus pais, Heloísio e Josiane, e aos meus irmãos Daniel e Ricardo por todo o apoio que sempre tive;

ao restante da minha família, pela ajuda nos tempos difíceis;

à D. Maria José, Sr. João, Mariele e Ariele, pelo carinho com o qual me receberam em suas vidas;

aos amigos do Departamento de Física da Universidade Federal de Viçosa;

e a todos os professores com os quais convivi em todas as fases de minha vida.

Um agradecimento especial ao CNPq pelo apoio financeiro nestes quatro anos.

Resumo

Estudamos o efeito do acoplamento de um oscilador harmônico a um ambiente externo modelado por N osciladores não-lineares de dois graus de liberdade, cujo regime dinâmico varia, do regular ao caótico, de acordo com um parâmetro de controle. O acoplamento entre o oscilador e o ambiente é bilinear nas coordenadas de cada subsistema e reescala de acordo com o tamanho do ambiente. O foco está centrado nas condições, sobre o número de graus de liberdade e o regime dinâmico dos osciladores não-lineares, para que ocorra a dissipação de energia e termalização do sistema. O trabalho foi desenvolvido num contexto clássico e baseado em um única realização dinâmica, opondo-se à média de *ensemble* sobre várias realizações. O principal resultado desta tese, é que um ambiente caótico finito, composto por um número razoavelmente pequeno de graus de liberdade, pode simular a ação de um reservatório térmico infinito, dissipando a energia do oscilador a uma taxa exponencial e conduzindo-o à termalização com uma distribuição de Boltzmann para uma temperatura muito bem definida. Baseados na Teoria de Resposta Linear, desenvolvemos um modelo analítico simples que justifica a reescala do acoplamento e reproduz as simulações numéricas quando o ambiente está no regime caótico.

Abstract

We study the coupling of a harmonic oscillator (HO) to an external environment modeled by N two-degrees-of-freedom nonlinear oscillators, ranging from integrable to chaotic according to a control parameter. The coupling between the HO and the environment is bilinear in the coordinates and scales with the environment size. We study the conditions for energy dissipation and thermalization as a function of N and of the dynamical regime of the nonlinear oscillators. The study is classical and based on a single realization of the dynamics, as opposed to ensemble averages over many realizations. The main result of this thesis is that the chaotic finite environment, composed by a fairly small number of degrees of freedom, can simulate the action of a infinite thermal reservoir, promoting the dissipation at an exponential rate and leading to the thermalization in a Boltzmann distribution of energies for a well-defined temperature. We develop a simple analytical treatment, based on the linear response theory, that justifies the coupling scaling and reproduces the numerical simulations when the environment is in the chaotic regime.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Motivação	1
1.2	Definição do problema	2
1.3	Estrutura da tese	3
2	Métodos e conceitos preliminares	5
2.1	Movimento Browniano Clássico	5
2.2	Conjunto de osciladores harmônicos sob a ação de uma força externa $F(t)$	8
2.3	Modelo de Dissipação Caldeira-Leggett	9
2.4	Banhos caóticos de baixa dimensionalidade	15
2.5	Teoria da Resposta Linear	17
2.5.1	Teoria da Resposta Linear aplicada a um banho de osciladores harmônicos	23
2.6	Considerações finais	24
3	O tratamento numérico	27
3.1	Estrutura geral	28
3.2	O Potencial Quártico	29
3.2.1	A propriedade de reescala	31
3.3	Dissipação efetiva via acoplamento com um banho caótico finito.	32
3.3.1	As condições iniciais	34
3.4	Resultados numéricos	37
3.4.1	Banho no regime integrável ($a = 1.0$)	37
3.4.2	Banho no regime misto ($a = 0.5$)	38
3.4.3	Banho no regime caótico ($a = 0.01$)	40
3.4.4	Observação sobre o conjunto de parâmetros do problema	44
3.4.5	Distribuição de energia do banho	47

3.4.5.1	Regime integrável	48
3.4.5.2	Regime misto	49
3.4.5.3	Regime caótico	50
3.5	O Teorema de Equipartição da Energia	51
3.6	O banho finito como um reservatório térmico	54
3.7	Considerações finais	55
4	O tratamento analítico	57
4.1	A Teoria de Resposta Linear aplicada ao banho	58
4.2	Função Resposta para N sistemas quárticos não interagentes	60
4.3	A Teoria de Resposta Linear para tempos longos	67
4.4	Considerações finais	74
5	Conclusões e perspectivas	75
5.1	Principais conclusões	75
5.2	Perspectivas e próximos passos	77
5.3	Considerações finais	78
A	O Teorema da Flutuação-Dissipação	79
B	Cálculo da integral	85
C	O Potencial Carmônico	87
C.1	O banho de Sistemas Carmônicos	89
C.1.1	Parametrização para o Potencial Carmônico	90
C.2	Dissipação efetiva utilizando o Potencial Carmônico	92

Capítulo 1

Introdução

*“No equilíbrio a matéria é cega,
é fora do equilíbrio que ela começa a ver.”*

Ilya Prigogine em “O Fim das Certezas?”

1.1 Motivação

Esta introdução contém, de maneira bastante resumida e informal, um pouco de tudo o que motiva este trabalho. Embora a irreversibilidade não seja o tema central de nosso estudo, as inúmeras e intrigantes questões sobre sua origem nos sistemas mecânicos, são o ponto de partida de grande parte de toda a motivação. A manifestação macroscópica da irreversibilidade contrapõem-se à simetria temporal das equações dinâmicas da Mecânica Clássica e da Mecânica Quântica e este fato, aparentemente paradoxal, sempre esteve no centro das inúmeras e profundas discussões sobre o tema. No nosso problema, a irreversibilidade também manifesta-se, mas tem apenas um papel coadjuvante, o foco está centrado no fenômeno da dissipação. Falando informalmente, lidamos com um sistema dissipativo finito e fechado, no qual a dissipação está caracterizada pelo fluxo irreversível¹ de energia entre dois subsistemas.

A dissipação, um dos principais fenômenos associados à condição de não equilíbrio, é um dos mecanismos básicos responsáveis pela relaxação da maioria dos sistemas físicos e tem sido visto como um processo intimamente relacionado à outros fenômenos interessantes, como, por exemplo, à auto-organização em sistemas quânticos [1, 2]. É fato que, desde a descoberta do Movimento Browniano

¹É importante que fique claro que não usamos, nesta tese, o termo irreversível no seu sentido matemático estrito. A irreversibilidade manifesta-se, no nosso problema, por meio da inobservância numérica do fluxo regular reverso dentro das escalas de tempo estudadas. Em outras palavras, se A perde energia para B, não visualizamos, mesmo para tempos de integração extremamente grandes, o fluxo de B para A.

[3], muito sucesso vem sendo alcançado na busca pela compreensão dos mecanismos responsáveis pelo surgimento de ambientes dissipativos, mas a maioria dos modelos teóricos desenvolvidos, ou são fenomenológicos ou um pouco artificiais, na medida que, em muitos casos, não é possível fazer um paralelo direto com sistemas reais. Portanto, ainda existem algumas questões fundamentais não respondidas que podem contribuir para uma compreensão da origem dinâmica dos fenômenos dissipativos.

Neste trabalho, abordamos a questão do número de graus de liberdade dos sistemas físicos reais e esta é uma questão muito pertinente, uma vez que o crescente avanço no desenvolvimento de sistemas físicos em escalas cada vez menores atingiu um patamar em que faz-se necessário levar em conta a finitude do sistema. Sistemas desta natureza não podem ser descritos, *a priori*, a partir dos resultados da termodinâmica clássica, já que não estão necessariamente no limite termodinâmico. Por outro lado, nem sempre podemos aplicar métodos quânticos puros, dado que existem exemplos, como a molécula de C_{60} , para o qual a interação entre os graus de liberdade internos produz um significativo efeito de classicalização [4]. Estas dificuldades naturais colocam estes sistemas finitos numa região um pouco desconfortável, onde o número de graus de liberdade não é grande o suficiente para que desconsideremos a dinâmica microscópica² e não é pequena o suficiente para que um tratamento analítico completo seja possível. As razões acadêmicas para o estudo de sistemas finitos, por si só, justificam todo o esforço a ser empregado nesta tarefa, mas não podemos negar que há toda uma gama de novas possibilidades tecnológicas envolvidas. Há muito ainda o que se fazer, mas esperamos que o trabalho apresentado nesta tese contribua, com pelo menos um passo, nessa longa caminhada.

1.2 Definição do problema

Baseado no esquema geral proposto por Feynman e Vernon [5], onde o sistema de interesse, com poucos graus de liberdade, está acoplado com um ambiente externo com muitos graus de liberdade, estudaremos, numérica e analiticamente, o comportamento dinâmico *efetivo* de um oscilador harmônico acoplado com um ambiente externo representado por N osciladores não lineares. Focaremos nossa análise, principalmente, no papel que tanto o número de graus de liberdade como o regime dinâmico do ambiente desempenham no estabelecimento de um regime dissipativo. O termo “*efetivo*” refere-se, aqui, aos fenômenos obtidos a partir de uma única realização dinâmica do sistema, ou seja, a partir de uma única trajetória global. Analisaremos, também, se, aliada à tendência à relaxação, podemos estabelecer uma condição de *termalização* entre os subsistemas no equilíbrio.

²O termo “dinâmica microscópica” refere-se à dinâmica individual de cada grau de liberdade do sistema.

1.3 Estrutura da tese

O texto foi elaborado de forma que o encadeamento dos resultados seja o mais natural possível. Por isso, começamos a preparar o espírito do leitor para as questões mais importantes no Capítulo 2, onde apresentamos, resumidamente, os principais modelos que lidam com ambientes dissipativos e, dentro deles, destacamos os pontos que merecem um olhar mais atento. Nas seções 2.1 e 2.3 falamos sobre dois dos mais célebres modelos dissipativos: o Movimento Browniano Clássico e o Modelo Caldeira-Leggett. Na seção 2.4 tecemos alguns comentários sobre modelos que utilizam banhos caóticos de baixa dimensionalidade, e damos um pouco mais de ênfase ao trabalho que serviu como ponto de partida para esta tese. A seção 2.5 apresenta a Teoria de Resposta Linear, objeto central no tratamento analítico proposto aqui. Algumas outras seções estão contidas, também, no Capítulo 2. No caso da seção 2.2, o intuito é facilitar a obtenção da solução geral da equação de movimento de cada oscilador no modelo Caldeira-Leggett e evidenciar a equivalência da solução encontrada a partir da Teoria de Resposta Linear contida na seção 2.5.1.

O capítulo 3 traz a primeira parte dos resultados originais desta tese. A seção 3.1 apresenta o tipo de sistema a ser tratado e explicita a nomenclatura utilizada. A próxima seção, 3.2, define o sistema que compõem nosso *ambiente externo* ou *banho* e destaca as suas principais propriedades. Em seguida, em 3.3, apresentamos a Hamiltoniana completa, composta por um oscilador harmônico acoplado ao ambiente externo e definimos o modo como estabelecemos as condições iniciais utilizadas para a obtenção da solução numérica das equações de movimento. Os principais resultados numéricos sobre a dissipação via acoplamento com o banho finito estão contidas na seção 3.4, onde mostramos a influência do regime dinâmico (integrável, misto e caótico) e do número de graus de liberdade do banho sobre o comportamento dinâmico do oscilador harmônico. Comparamos as distribuições de energia para o oscilador e para o banho, obtidas por meio de médias no *ensemble* e no tempo para verificar a ergodicidade do sistema. Nas duas últimas seções 3.5 e 3.6, tratamos da possibilidade de definição de uma temperatura de equilíbrio entre o oscilador e o banho com um número finito de graus de liberdade.

O Capítulo 4 contém o modelo analítico proposto para descrição dos resultados numéricos do Capítulo 3. Na seção 4.1, explicitamos a equação dinâmica do oscilador harmônico e justificamos a aplicação da Teoria de Resposta Linear. Em seguida, seção 4.2, calculamos, passo a passo, a Função Resposta do problema, para mais adiante, na seção 4.3, verificarmos sob que condições podemos utilizar a Teoria de Resposta Linear para analisar a dinâmica do oscilador harmônico a tempos longos e validar o modelo e os resultados obtidos.

Por fim, no capítulo 5 condensamos as principais conclusões e esboçamos o leque de possibilidades e perspectivas que se abre por conta dos resultados alcançados.

Acrescentamos, também, alguns apêndices que podem facilitar e ilustrar a compreensão destes

resultados.

Capítulo 2

Métodos e conceitos preliminares

“The most exciting phrase to hear in science, the one that heralds new discoveries, is not "Eureka!" but rather "hmm....that's funny..."
Isaac Asimov

Neste capítulo apresentaremos, de forma breve, alguns dos principais modelos que descrevem ambientes dissipativos. O principal intuito aqui é destacar as principais características de cada modelo conectando-as com o nosso. Partimos do famoso problema do movimento Browniano, passando pelo modelo Caldeira-Leggett e chegando, por fim, nos modelos mais recentes que utilizam sistemas caóticos de baixa dimensionalidade. Dentre estes últimos, enfatizamos o trabalho de Bonança e Aguiar [6], cuja generalização deu origem a esta tese. Terminamos o capítulo, desenvolvendo a Teoria de Resposta Linear que servirá de base para o tratamento analítico desenvolvido no Capítulo 4.

2.1 Movimento Browniano Clássico

Todo sistema físico pode ser considerado fechado quando incluímos o ambiente que o circunda. Na imensa maioria das vezes o ambiente externo é extremamente complicado, fato que nos impede de modelá-lo e tratá-lo analiticamente. No entanto, existem alguns contraexemplos a esta regra e o mais célebre deles, é o conhecido movimento Browniano [3], visualizado num microscópio, em 1828, pelo biólogo Robert Brown e tratado, desde então, por muitos outros [7, 8, 9]. Resumidamente, o problema consiste no estudo da dinâmica de uma partícula relativamente massiva, imersa num fluido com viscosidade $2m\gamma$, sujeita a uma força randômica provocada pela colisão com as partículas microscópicas que

compõem o fluido. Em essência, o movimento Browniano fornece evidências, na escala macroscópica, da natureza atômica da matéria.

É possível fazer uma descrição fenomenológica do movimento Browniano por meio da obtenção da equação de movimento Newtoniana da partícula macroscópica, incluindo uma força de atrito sistemática e uma força aleatória $F(t)$ que simula a ação dos inúmeros graus de liberdade do meio onde a partícula está imersa. A esta equação de movimento dá-se o nome de *equação de Langevin* [10] e pode ser escrita como¹

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -2m\gamma \frac{dx(t)}{dt} - V'(x) + F(t), \quad (2.1)$$

onde $V(x)$ é um potencial externo e γ é a constante de arrasto do meio. Considera-se que a massa da partícula é muito maior do que a massa dos átomos constituintes do fluido. Por outro lado, assume-se que a velocidade da partícula é muito menor do que a dos átomos e que ela é resultado das incessantes colisões promovidas pelas flutuações na densidade do meio. Além disso, assume-se que a força flutuante $F(t)$ é um processo Gaussiano, com ruído branco (processo Markoviano) e média nula $\langle F(t) \rangle = 0$. O ruído branco implica que

$$\langle F(t)F(s) \rangle = 4m\gamma k_B T \delta(t-s), \quad (2.2)$$

ou seja, não existe efeito de memória na força, o que significa dizer que cada “colisão” pode ser vista como um evento independente dos demais. Assumindo um potencial externo harmônico, $V(x) = m\omega_0^2 x^2/2$ e que $x(0) = x_0$ e $p(0) = p_0$ pode-se mostrar que

$$x(t) = x_0 \left[e^{-\gamma t} \cos(\omega t) + \frac{\gamma}{\omega} e^{-\gamma t} \sin(\omega t) \right] + \frac{p_0}{m\omega} e^{-\gamma t} \sin(\omega t) + \frac{1}{\gamma} \int_0^t e^{-\gamma(t-s)} \frac{\sin[\omega(t-s)]}{m\omega} F(s) ds \quad (2.3)$$

onde $\omega^2 = \omega_0^2 - \gamma^2$. A equação (2.3) refere-se à dinâmica da partícula para uma única realização de $F(t)$. Obviamente, a aleatoriedade de F nos impede o acesso à solução do sistema para cada realização, portanto faz sentido que, ao invés de $x(t)$, olhemos para o comportamento da média $\langle x(t) \rangle$, obtida a partir de várias realizações da força $F(t)$. Assim, obtemos

$$\langle x(t) \rangle = x_0 \left[e^{-\gamma t} \cos(\omega t) + \frac{\gamma}{\omega} e^{-\gamma t} \sin(\omega t) \right] + \frac{p_0}{m\omega} e^{-\gamma t} \sin(\omega t) \quad (2.4)$$

o que nos permite mostrar que a variância na posição pode ser escrita como

$$\langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2 = \frac{k_B T}{m} \frac{e^{-2\gamma t}}{\omega_0^2} \left[e^{2\gamma t} + \frac{\gamma^2}{\omega^2} \cos(2\omega t) - \frac{\gamma}{\omega} \sin(2\omega t) - \frac{\gamma^2}{\omega^2} - 1 \right].$$

¹Para uma discussão bastante completa e atual do movimento Browniano, recomenda-se a referência Rachel [11].

Para tempos curtos, ou no regime em que $\gamma/\omega \ll 1$ temos

$$\langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2 \approx 2 \frac{\gamma k_B T}{m\omega^2} t \quad (2.5)$$

e a constante $D = \frac{\gamma k_B T}{m\omega^2}$ pode ser vista como uma constante difusiva. Já no limite $t \rightarrow \infty$ verificamos que

$$\langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2 \approx \frac{k_B T}{m\omega_0^2}. \quad (2.6)$$

As equações (2.5) e (2.6) nos dizem que a constante de difusão e a variância, que pode ser encarada como uma medida das flutuações de $x(t)$, estão diretamente associadas à temperatura do sistema. Portanto, no equilíbrio a tempos longos, toda a dinâmica da partícula é fruto das inúmeras colisões com os graus de liberdade microscópicos do fluido. Em outras palavras, toda a energia associado à partícula em $t = 0$ foi absorvida pelo fluido. De fato, assumindo, por simplicidade, que $x_0 = 0$, mostra-se que o valor médio da energia da partícula pode ser escrito como

$$\langle E(t) \rangle = \bar{E}(t) + k_B T e^{-2\gamma t} \left[\frac{\gamma^2}{\omega^2} \cos(2\omega t) + e^{2\gamma t} - \frac{\gamma^2}{\omega^2} - 1 \right],$$

com

$$\bar{E}(t) = E_0 e^{-2\gamma t} \left[1 + 2 \frac{\gamma}{\omega} \sin(2\omega t) \left(\frac{\gamma}{\omega} \sin(2\omega t) - \cos(\omega t) \right) \right].$$

Assim podemos mostrar que a energia média da partícula tende a $k_B T$ no regime assintótico. Portanto, qualquer que seja o valor da energia inicial E_0 da partícula, mostra-se que, na média, o sistema termaliza em $\bar{E} = k_B T$.

O sucesso do modelo da partícula Browniana está intimamente relacionado à ampla gama de aplicações, que vai desde os efeitos do ruído térmico em circuitos RC, até a dinâmica do valor de ações sujeitas à flutuações da bolsa de valores. Mesmo diante de tanto sucesso, se lançarmos um olhar um pouco mais crítico sobre o modelo, podemos enxergar algumas questões não respondidas. Por exemplo, não é possível saber com quantos graus de liberdade do meio a partícula efetivamente interage. Outro ponto é que a randomicidade de $F(t)$ gera grandes flutuações na dinâmica da partícula, o que impede uma descrição eficiente da sua dinâmica efetiva (a partir de uma única realização). Portanto, sabendo que na vida real os sistemas físicos não necessitam de diversas realizações para exibirem comportamento dissipativo, cabe perguntar que condições o meio externo deve satisfazer para que a dissipação ocorra efetivamente, ou seja, sem realizações de médias. Uma maneira de tentar responder a algumas destas questões é tentar criar modelos que permitam o acesso à dinâmica microscópica do sistema, mas que possam ser tratados analiticamente. Neste capítulo, esboçaremos alguns destes modelos com o intuito de mostrar os mecanismos capazes de conduzir um sistema físico ao equilíbrio.

Na próxima seção, resolveremos um problema simples de forma que ganhemos um pouco mais de intuição.

2.2 Conjunto de osciladores harmônicos sob a ação de uma força externa $F(t)$

Imaginemos um sistema composto por um conjunto finito de osciladores harmônicos e suponhamos que, em $t = 0$, surja uma força externa $F(t)$ capaz de perturbar a dinâmica de equilíbrio do sistema (ver fig.2.1).

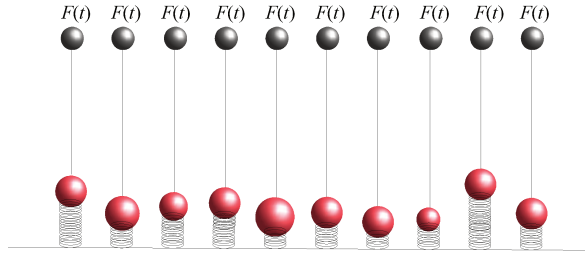


Figura 2.1: Esquema que representa um conjunto de osciladores harmônicos distintos sob a ação da mesma força $F(t)$.

Gostaríamos de estudar o comportamento do sistema completo, a partir do estudo das soluções individuais de cada oscilador. A equação diferencial que rege o comportamento de cada oscilador é

$$\ddot{x}_i + \omega_i^2 x_i = \frac{1}{m_i} F(t). \quad (2.7)$$

Aplicando a transformada de Laplace na equação (2.7) temos

$$\mathcal{L}\{\ddot{x}_i\} + \omega_i^2 \mathcal{L}\{x_i\} = \frac{1}{m_i} \mathcal{L}\{F(t)\}.$$

Como

$$\mathcal{L}\{f^{(n)}(t)\} = s^n \mathcal{L}\{f(t)\} - \sum_{i=1}^n s^{(n-i)} f^{(i-1)}(0)$$

temos

$$s^2 \mathcal{L}\{x_i(t)\} - s x_i(0) - \dot{x}_i(0) + \omega_i^2 \mathcal{L}\{x_i(t)\} = -\frac{1}{m_i} \mathcal{L}\{F(t)\},$$

ou seja,

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

Aplicando a transformada inversa

$$\mathcal{L}^{-1}\mathcal{L}\{x_i(t)\} - \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{s}{s^2 + \omega_i^2}\right\}x_i(0) - \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{1}{s^2 + \omega_i^2}\right\}\dot{x}_i(0) = -\frac{1}{m_i}\mathcal{L}^{-1}\left\{\left(\frac{1}{s^2 + \omega_i^2}\mathcal{L}\{F(t)\}\right)\right\},$$

chegamos a

$$x_i(t) - x_i(0)\cos\omega_i t - \frac{\dot{x}_i(0)}{\omega_i}\sin\omega_i t = -\int_0^t \frac{\sin[\omega_i(t-s)]}{m_i\omega_i}F(s)ds.$$

Como os osciladores são não interagentes, se quisermos olhar para o comportamento coletivo do conjunto, podemos efetuar a soma sobre todos os osciladores, ou seja,

$$\begin{aligned} X(t) &= \sum_{i=1}^N x_i(t) = \sum_{i=1}^N \left(x_i(0)\cos\omega_i t + \frac{\dot{x}_i(0)}{\omega_i}\sin\omega_i t \right) - \int_0^t \left[\sum_{i=1}^N \frac{\sin[\omega_i(t-s)]}{m_i\omega_i} \right] F(s)ds \\ &= X_0(t) - \int_0^t \left[\sum_{i=1}^N \frac{\sin[\omega_i(t-s)]}{m_i\omega_i} \right] F(s)ds. \end{aligned} \quad (2.8)$$

A grandeza $X(t)$ pode ser vista como uma variável “macroscópica” do sistema, escrita em termos das dependência temporal das variáveis “microscópicas”. Note que o primeiro termo, $X_0(t)$, corresponde à solução de equilíbrio do sistema, ou seja, quando não existe força externa. O segundo está associado à resposta do sistema à perturbação externa e depende da forma de $F(t)$.

Com o intuito de estudar os efeitos da interação com um meio externo sobre a dinâmica de um sistema de interesse qualquer, Caldeira e Leggett [12], criaram um modelo capaz de simular a ação de um reservatório térmico sobre o sistema de interesse. Uma das principais consequências do modelo Caldeira-Leggett, descrito resumidamente na próxima seção, é a possibilidade de tratamento quântico de sistemas dissipativos.

2.3 Modelo de Dissipação Caldeira-Leggett

A ideia de simular a ação de um ambiente externo por meio de um conjunto de osciladores harmônicos (fig. 2.2) pode parecer ingênua e, até mesmo, um pouco artificial, mas em muitos casos mostrou-se muito eficiente como aproximação de sistemas realísticos, desde que estes últimos satisfaçam uma das seguintes hipóteses:

- o ambiente é fracamente perturbado pelo sistema de interesse, de forma que seja possível tomar os termos de mais baixa ordem numa teoria de perturbação;
- a interação entre o sistema de interesse e o ambiente pode ser tratada dentro da aproximação

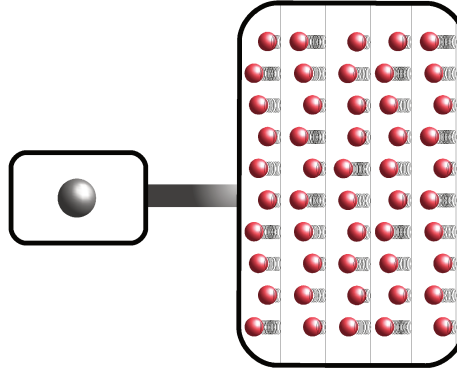


Figura 2.2: Representação pictórica do modelo Caldeira-Leggett.

adiabática, ou seja, quando o sistema de interesse for muito mais lento do que os graus de liberdade do ambiente externo.

Em linhas gerais, o modelo segue o esquema proposto por Feynman e Vernon [5] e o sistema completo é descrito pela Lagrangiana

$$L = L_S + L_I + L_R$$

com

$$L_S = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - V(q) \quad (2.9)$$

$$L_R = \sum_{k=1}^N \left[\frac{1}{2}m_k\dot{x}_k^2 - \frac{1}{2}m_k\omega_k^2 x_k^2 \right] \quad (2.10)$$

$$L_I = - \sum_{k=1}^N C_k q x_k \quad (2.11)$$

em que L_S , L_B e L_I são as Lagrangianas do sistema de interesse, do banho de osciladores e da interação. Note que o banho é representado por uma soma finita de osciladores harmônicos de massa m_k , frequência ω_k , com coordenadas x_k , com $k = 1, \dots, N$. Já o acoplamento é bilinear nas coordenadas dos dois subsistemas².

²Pode-se construir um modelo equivalente onde o acoplamento é bilinear entre a coordenada (q) do sistema de interesse e as velocidades (\dot{x}_k). Neste caso, não é necessário a inclusão do contra-termo (eq. equação (2.16)), que veremos a seguir.

As equações de movimento extraídas de (2.9), (2.10) e (2.11) são

$$m\ddot{q} + V'(q) = - \sum_{k=1}^N C_k x_k(t) \quad (2.12)$$

e

$$m_k \ddot{x}_k + m_k \omega_k^2 x_k(t) = -C_k q(t). \quad (2.13)$$

Note que a dinâmica do sistema de interesse perturba, por meio de $q(t)$, cada um dos osciladores, atuando como uma espécie de força externa com intensidade dada pela constante de acoplamento C_k . A solução da eq. (2.13) foi obtida na seção anterior e é dada por

$$\begin{aligned} x_k(t) &= x_k(0) \cos(\omega_k t) + \frac{\dot{x}_k(0)}{\omega_k} \sin(\omega_k t) - \frac{C_k}{m_k \omega_k} \int_0^t \sin[\omega_k(t-s)] q(s) ds \\ &= x_k^{(0)}(t) - \frac{C_k}{m_k \omega_k} \int_0^t \sin[\omega_k(t-s)] q(s) ds \end{aligned}$$

onde $x_k^{(0)}(t)$ é a solução desacoplada. Integrando por partes a integral acima temos

$$x_k(t) = x_k^{(0)}(t) - \frac{C_k}{m_k \omega_k^2} q(t) + \frac{C_k}{m_k \omega_k^2} \cos(\omega_k t) q(0) + \frac{C_k}{m_k \omega_k} \int_0^t \cos[\omega_k(t-s)] \dot{q}(s) ds. \quad (2.14)$$

Substituindo (2.14) na equação de movimento (2.12) obtemos

$$m\ddot{q}(t) + \left[V'(q) - \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} q(t) \right] + \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \int_0^t \cos[\omega_k(t-s)] \dot{q}(s) ds = - \sum_{k=1}^N C_k x_k^{(0)}(t) - \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \cos(\omega_k t) q(0). \quad (2.15)$$

É importante notar que, da forma como foi escrita a Lagrangiana, surge um termo de correção harmônica para o potencial. Se desejarmos que $V(q)$ seja o potencial efetivo sentido pelo sistema de interesse, devemos introduzir o contra-termo

$$\Delta V(x) = \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} q^2(t) \quad (2.16)$$

na Lagrangiana do sistema. Fazendo esta correção do potencial efetivo, podemos, portanto, escrever a dinâmica de qualquer um dos graus de liberdade do sistema composto a partir da nova Lagrangiana

$$L = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - V(q) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N m_k (\dot{x}_k^2 - \omega_k^2 x_k^2) - \sum_{k=1}^N C_k x_k q - \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} q^2.$$

A equação de movimento então será dada por

$$m\ddot{q}(t) + V'(q) + \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \int_0^t \cos[\omega_k(t-s)] \dot{q}(s) ds = - \sum_{k=1}^N C_k x_k^{(0)}(t) - \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \cos(\omega_k t) q(0),$$

que pode ser reescrita como

$$m\ddot{q}(t) + V'(q) + \int_0^t \gamma(t-s) \dot{q}(s) ds = F(t), \quad (2.17)$$

onde

$$\gamma(t-s) = \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \cos[\omega_k(t-s)] \quad (2.18)$$

e

$$F(t) = - \sum_{k=1}^N C_k x_k^{(0)}(t) - \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \cos(\omega_k t) q(0). \quad (2.19)$$

A equação (2.17) é uma equação de Langevin generalizada e leva em consideração os efeitos de "memória" do reservatório. É importante salientar que a força $F(t)$ depende explicitamente das condições iniciais do reservatório e da posição inicial $q(0)$.

Como vimos na seção anterior, $\gamma(t-s)$ está relacionado à resposta do banho à perturbação externa provocada pelo sistema de interesse. Na verdade, podemos mostrar que a eq. (2.18) está associada à uma grandeza física importante, a saber, a susceptibilidade dinâmica retardada do reservatório, definida por

$$\chi^r(t-s) = -\Theta(t-s) \left\langle \left\{ \sum_{k=1}^N C_k x_k^{(0)}(t), \sum_{k=1}^N C_k x_k^{(0)}(s) \right\} \right\rangle. \quad (2.20)$$

A susceptibilidade dinâmica é uma espécie de medida da resposta do reservatório devido à força externa $c_k x(t)$. Na seção 2.5 veremos que ela nada mais é do que função resposta do banho, na teoria de resposta linear³. Na verdade, o que faremos é mostrar que $\gamma(t-s)$ pode ser escrita em termos da função espectral $J(\omega)$, definida por

$$J(\omega) = \text{Im} [\mathcal{F} \{ \chi^r(t-s) \}], \quad (2.21)$$

³Uma maneira alternativa para obtenção da susceptibilidade dinâmica pode ser vista no apêndice A

a transformada de Fourier da susceptibilidade dinâmica do reservatório. Para isto, devemos notar que, como os osciladores do banho são independentes, podemos reescrever (2.20) como

$$\begin{aligned}
\chi^r(t-s) &= -\Theta(t-s) \left\langle \left\{ \sum_{k=1}^N C_k x_k^{(0)}(t), \sum_{k=1}^N C_k x_k^{(0)}(s) \right\} \right\rangle \\
&= -\Theta(t-s) \sum_{k=1}^N C_k^2 \langle \{x_k^{(0)}(t), x_k^{(0)}(s)\} \rangle \\
&= -\Theta(t-s) \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k} \langle \cos(\omega_k t) \sin(\omega_k s) - \sin(\omega_k t) \cos(\omega_k s) \rangle \\
&= -\Theta(t-s) \sum_{k=1}^N C_k^2 \frac{\sin[\omega_k(t-s)]}{m_k \omega_k} \\
&= -\Theta(t-s) \sum_{k=1}^N C_k^2 \chi_k(t-s), \tag{2.22}
\end{aligned}$$

onde χ_k é a susceptibilidade dinâmica retardada de cada um dos osciladores do reservatório. Calculando a transformada de Fourier de (2.22) obtemos

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}\{\chi^r(t-s)\} &= \tilde{\chi}^r(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \Theta(t-s) \sum_{k=1}^N C_k^2 \frac{\sin[\omega_k(t-s)]}{m_k \omega_k} dt \\
&= \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k} \int_0^{\infty} e^{i\omega t} \sin(\omega_k t) dt.
\end{aligned}$$

Daí

$$\begin{aligned}
J(\omega) &= \text{Im}[\tilde{\chi}^r(\omega)] = \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k} \text{Im} \left[\int_0^{\infty} e^{i\omega t} \sin(\omega_k t) dt \right] \\
&= \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k} \int_0^{\infty} e^{i\omega t} \sin(\omega_k t) \sin(\omega t) dt.
\end{aligned}$$

Utilizando a identidade

$$\delta(z-y) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \sin(zt) \sin(yt) dt,$$

temos

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{k=1}^N C_k^2 \frac{\delta(\omega - \omega_k)}{m_k \omega_k} = \sum_{k=1}^N C_k^2 J_k,$$

onde

$$J_k = \frac{\pi}{2} \frac{\delta(\omega - \omega_k)}{m_k \omega_k}. \tag{2.23}$$

Para que a dissipação seja ôhmica deve-se definir a função espectral como

$$J(\omega) = \eta\omega\Theta(\omega_c - \omega) = \begin{cases} \eta\omega, & \omega \leq \omega_c \\ 0, & \omega > \omega_c. \end{cases} \quad (2.24)$$

Com esta escolha temos, admitindo $\omega_c \gg \omega$

$$\begin{aligned} \gamma(t-s) &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\omega_c} \frac{J(\omega)}{\omega} \cos \omega(t-s) d\omega \\ &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\omega_c} \eta \cos \omega(t-s) d\omega \\ &= \frac{2}{\pi} \eta \int_0^{\omega_c} [\cos \omega t \cos \omega s + \sin \omega t \sin \omega s] d\omega \\ &\approx \eta [\delta(t-s) + \delta(t-s)] = 2\eta\delta(t-s), \end{aligned}$$

ou seja, retornando a (2.17) temos

$$\int_0^t \gamma(t-s)\dot{q}(s)ds = 2\eta \int_0^t \delta(t-s)\dot{q}(s)ds = \eta\dot{q}(t).$$

Logo a equação de Langevin generalizada (2.17) pode ser reescrita como

$$m\ddot{q}(t) + V'(q) + \eta\dot{q}(t) = F(t), \quad (2.25)$$

com

$$F(t) = -\sum_{k=1}^N C_k x_k^{(0)}(t) - \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \cos(\omega_k t) q(0).$$

Pode-se mostrar que $\langle F(t) \rangle = 0$ e, através do Teorema da Flutuação-Dissipação, verifica-se que $\langle F(t)F(t') \rangle = \eta k_B T \delta(t-t')$. Portanto, a equação (2.25) descreve a interação instantânea entre o sistema de interesse e o reservatório e é qualitativamente idêntica à equação para o movimento Browniano. Logo, podemos afirmar que o banho de osciladores simula a ação de um fluido viscoso cujas flutuações atuam como um ruído branco. Como consequência, o sistema também termaliza, ou seja, o banho de osciladores atua como um reservatório térmico.

O fato que gostaríamos de destacar é que, ao tomar a função espectral $J(\omega)$, dada por (2.24), estamos assumindo o limite termodinâmico, ou seja, estamos considerando o banho no limite $N \rightarrow \infty$. Além disso, assim como no caso do movimento Browniano, o comportamento dissipativo pode ser visto somente após diversas realizações do sistema. De fato, Manchein, Rosa e Beims [13, 14], mostram, a partir de resultados numéricos, que para sistemas análogos ao modelo Caldeira-Leggett, a dissipação é visualizada para $N \gtrsim 400$, sendo necessária a realização de médias no ensemble.

Desta forma, devido à importância deste modelo, devemos ter em mente que um banho finito de osciladores, não é capaz de promover a dissipação efetiva da energia do sistema de interesse. O regime dinâmico regular do banho, como veremos, dificulta o surgimento de processos Markovianos. Os efeitos de memória da dinâmica microscópica do banho, somente são aniquilados quando tomamos o limite $N \rightarrow \infty$, onde a força flutuante pode ser encarada como um ruído branco.

2.4 Banhos caóticos de baixa dimensionalidade

O modelo Caldeira-Leggett mostra que o conjunto de osciladores do banho, mesmo com dinâmica microscópica regular, é capaz de criar um ambiente dissipativo. No entanto as funções de correlação dinâmica (por exemplo, $\langle x_k(t)x_k(s) \rangle$) no regime harmônico exibem comportamento periódico. Esta periodicidade cria um ambiente dinâmico não-Markoviano, dificultando o surgimento de processos estocásticos no banho capazes de conduzir o sistema de interesse ao equilíbrio para N finito. Por isso, um passo natural, seria acrescentar a possibilidade de outros regimes dinâmicos no ambiente externo. Wilkinson [15], em 1990, é um dos primeiros a avaliar a influência que o caos, presente no ambiente, exerce sobre a dinâmica do sistema de interesse valendo-se das propriedades dos invariantes adiabáticos. Não entraremos em detalhes sobre os métodos utilizados neste trabalho. O que vale ressaltar aqui é que, segundo suas próprias palavras:

“O principal resultado deste artigo[15] é deixar claro que, neste modelo, a taxa de dissipação é drasticamente reduzida se o movimento dos osciladores microscópicos é regular, comparado com sistemas similares exibindo movimento caótico.”

Em outras palavras, o caos é capaz de tornar o ambiente dissipativo mais eficiente. Tanto Wilkinson, como Berry e Robbins [16], mostram que a invariância da superfície de energia do sistema caótico [17, 18, 19], em primeira ordem, faz com que o sistema de interesse sinta uma força conservativa do tipo Born-Oppenheimer. As correções de segunda ordem, geram uma força proporcional à velocidade, cuja parte simétrica corresponde a uma força de atrito e a antissimétrica ao que denomina-se *magnetismo geométrico* [15, 16]. A partir da publicação destes artigos pioneiros, surgiu um número significativo de trabalhos explorando a possibilidade de dissipação por meio do acoplamento com sistemas caóticos de baixa dimensão, tanto num contexto clássico [20, 21, 6, 13, 14], quanto num contexto quântico [22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32], onde a decoerência é o principal foco. O ponto comum a todos estes trabalhos é a realização de médias, principalmente do tipo microcanônica, eliminando, portanto, as grandes flutuações presentes em cada realização.

Dentre os trabalhos produzidos num contexto clássico, gostaríamos de destacar o elaborado por Bonança e Aguiar [6], no qual o sistema de interesse é um oscilador harmônico e o banho é composto

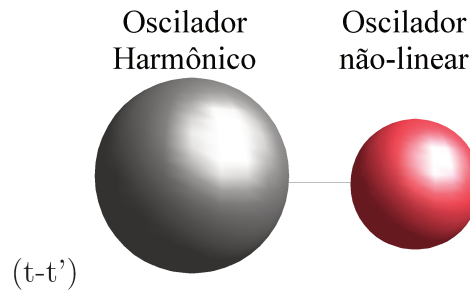


Figura 2.3: Esquema que representa o sistema composto por um oscilador harmônico (esfera cinza) acoplado a um único oscilador com dinâmica não linear (esfera vermelha).

por um único oscilador não linear, descrito pelo mesmo potencial utilizado nesta tese. A fig. 2.3 ilustra o modelo estudado em [6].

Em certo sentido, o modelo proposto aqui é uma generalização natural do que propuseram Bonança e Aguiar. Em [6], mostra-se que, quando o regime dinâmico do banho é caótico, podemos visualizar, na média, o fluxo de energia do sistema de interesse para o “banho”. Como dissemos acima, o pequeno número de graus de liberdade do sistema faz com que as flutuações dinâmicas sejam relativamente grandes, impedindo o estabelecimento de um regime dissipativo efetivo. Mesmo com um número tão baixo de graus de liberdade, Bonança e Aguiar mostram que é possível definir uma temperatura de equilíbrio por meio de uma análise da densidade de estados. Para isso, no entanto, precisam modificar a definição de entropia [33, 34] para contornar as dificuldades impostas pela baixa dimensionalidade do sistema.

Com o intuito de compreender a dinâmica global do sistema a partir do processo de interação entre os dois subsistemas, Bonança e Aguiar propõem um modelo analítico baseado na teoria de resposta linear (TRL) [35] e encontram resultados teóricos muito próximos aos obtidos numericamente. Mais uma vez, no entanto, a baixa dimensionalidade do sistema permite, somente, que esta análise seja feita para tempos suficientemente curtos, o que os impede de visualizar a tendência ao equilíbrio.

Nesta tese também utilizaremos a Teoria de Resposta Linear para a construção de um modelo analítico. A generalização do trabalho de Bonança e Aguiar, proposta no capítulo 3, acrescenta novos ingredientes ao modelo que nos permitem o uso da TRL para a descrição da dinâmica do sistema a tempos longos. Justifica-se portanto a necessidade de uma seção que trate do desenvolvimento da Teoria de Resposta Linear, explicitando as hipóteses necessárias para sua aplicação.

2.5 Teoria da Resposta Linear

Sempre que um sistema físico em equilíbrio estiver fracamente acoplado com uma fonte externa perturbadora, podemos, diante de alguns cuidados, desconsiderar os efeitos secundários provenientes desta interação. Matematicamente, isto significa, que podemos tomar somente os termos de mais baixa ordem na teoria de perturbação. Para a classe de sistemas que pretendemos estudar, os quais possuem um grande número de graus de liberdade, utilizaremos a Teoria de Resposta Linear como o método estatístico para a descrição macroscópica da dinâmica do sistema.

Para que tenhamos bastante claro o espírito da Teoria de Resposta Linear, imaginemos um sistema físico em equilíbrio em $t = 0$, que passa a ser perturbado por uma fonte externa $A(r, t)$. A interação do sistema com $A(r, t)$ altera, de alguma maneira, a dinâmica microscópica do sistema, mas o que é medido pelo detector é, somente, uma grandeza macroscópica, $B(r, t)$, associada ao seu estado perturbado. A ideia é conseguir, fora do equilíbrio, acesso aos efeitos macroscópicos do sistema, sabendo as condições microscópicas iniciais e a forma de interação.

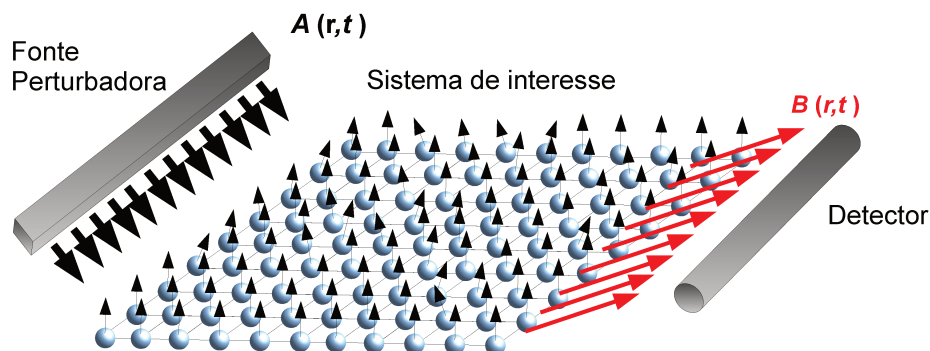


Figura 2.4: Esquema de um experimento. Por simplicidade, utilizamos uma rede de spin como exemplo.

Suponhamos, portanto, que conhecemos a função densidade (distribuição) de Liouville de um sistema mecânico arbitrário e a denotemos por $\rho(Q, P, t)$, onde $Q = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ e $P = (p_{x_1}, p_{x_2}, \dots, p_{x_n})$. Para um sistema em equilíbrio temos

$$\frac{d\rho}{dt}(Q, P, t) = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \left[\sum_n \frac{\partial \rho}{\partial x_n} \dot{x}_n + \frac{\partial \rho}{\partial p_{x_n}} \dot{p}_{x_n} \right] = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_n \left[\frac{\partial \rho}{\partial x_n} \frac{\partial H}{\partial p_{x_n}} - \frac{\partial \rho}{\partial p_{x_n}} \frac{\partial H}{\partial x_n} \right] = 0,$$

ou seja,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \{H, \rho\} = -iL\rho, \quad (2.26)$$

onde

$$L\rho = i \sum_n \left[\frac{\partial \rho}{\partial x_n} \frac{\partial H}{\partial p_{xn}} - \frac{\partial \rho}{\partial p_{xn}} \frac{\partial H}{\partial x_n} \right] = i \{H, \rho\}. \quad (2.27)$$

O operador L é conhecido como o **operador de Liouville** e a equação (2.26) como **equação de Liouville**. Existe uma equivalência entre as descrições dinâmicas a partir das equações de Hamilton e a da equação de Liouville. Dentro do escopo da descrição de sistemas com muitos graus de liberdade, muitas vezes a equação de Liouville é mais apropriada, uma vez que contém toda a informação sobre o sistema dentro de ρ . Portanto, ao lidarmos com a equação (2.26), estaremos interessados na “macrodinâmica” do sistema, ou seja, não nos preocuparemos com a dinâmica individual de cada um dos graus de liberdade do problema (“microvariáveis”). A dinâmica macroscópica é determinada pela evolução temporal da distribuição $\rho(Q, P, t)$ e regida pela equação (2.26). Obviamente, deixamos o espaço de funções habituais da mecânica Hamiltoniana, ficando imersos no espaço de distribuições da mecânica Liouvillian. No entanto, não nos focaremos nos detalhes formais deste espaço. Para tudo aquilo que nos interessa, ele é similar ao espaço de funções usuais.

Uma maneira de visualizarmos essa similaridade é a possibilidade de se construir uma teoria de perturbação análoga à dos sistemas Hamiltonianos. De fato, suponhamos que um sistema, em $t = 0$, passe a ser fracamente perturbado por uma fonte externa de forma que o sistema completo possa ser descrito pela seguinte Hamiltoniana

$$H = H_0 + H_I(t), \quad (2.28)$$

onde H_0 é a Hamiltoniana associada à condição de equilíbrio ($t < t_0 = 0$) e

$$H_I(t) = -A(Q, P)\chi(t) \quad (2.29)$$

é o termo perturbativo, composto pelo produto de um termo associado aos graus de liberdade do sistema e uma força externa dependente do tempo. Podemos verificar, utilizando (2.28) em (2.27), que

$$L\rho = i \{H_0, \rho\} + i \{H_I(t), \rho\} = (L_0 + L_I(t)) \rho$$

onde $L_0\rho = i \{H_0, \rho\}$ e $L_I\rho = i \{H_I(t), \rho\}$. Assim (2.26) fica:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = iL_0\rho(t) + iL_I(t)\rho(t). \quad (2.30)$$

A forma integral da equação (2.30) acima é dada por

$$\rho(t) = e^{i(t-t_0)L_0}\rho(t_0) + i \int_{t_0}^t e^{i(t-s)L_0} L_I(s)\rho(s)ds. \quad (2.31)$$

De fato, se utilizarmos a **regra de Leibniz**

$$\frac{d}{dz} \int_{a(z)}^{b(z)} f(x, z) dx = \int_{a(z)}^{b(z)} \frac{\partial f}{\partial z}(x, z) dx + f(b(z), z) \frac{db}{dz}(z) - f(a(z), z) \frac{da}{dz}(z)$$

e tomarmos a derivada de (2.31), temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t}(t) &= iL_0 e^{i(t-t_0)L_0} \rho(t_0) + i \left[iL_0 \int_{t_0}^t e^{i(t-s)L_0} L_I(s) \rho(s) ds + L_I(t) \rho(t) \right] \\ &= iL_0 \left[e^{i(t-t_0)L_0} \rho(t_0) + i \int_{t_0}^t e^{i(t-s)L_0} L_I(s) \rho(s) ds \right] + iL_I(t) \rho(t), \end{aligned}$$

onde a expressão entre colchetes é justamente a equação (2.31). Logo

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = iL_0 \rho(t) + iL_I(t) \rho(t).$$

Cabe ressaltar que

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

uma vez que a distribuição de equilíbrio é invariante por evolução temporal. Assim podemos reescrever a expressão (2.31) como

$$\rho(t) = \rho_e + i \int_{t_0}^t e^{i(t-s)L_0} L_I(s) \rho(s) ds. \quad (2.32)$$

Suponhamos, agora, que a introdução do termo perturbativo $L_I(t)$ produza algum efeito físico no sistema que possa ser descrito em termos das coordenadas generalizadas do sistema, por meio de uma função $B(Q, P)$. Como estamos lidando com distribuições, podemos determinar o valor médio de $B(Q, P)$ a partir da solução da equação de Liouville (2.32). De fato,

$$\begin{aligned} \langle B(Q, P) \rangle(t) &= \int B(Q, P) \rho(Q, P, t) dQ dP \\ &= \int B(Q, P) \rho(Q, P, t_0) dQ dP + i \iint_{t_0}^t B(Q, P) e^{i(t-s)L_0} L_I(s) \rho(Q, P, s) dQ dP ds \end{aligned} \quad (2.33)$$

O inconveniente da equação (2.33) é que não determinamos a solução $\rho(Q, P, t)$, logo não podemos descrever a evolução temporal do valor médio de B por meio de (2.33). No entanto, como estamos num regime perturbativo, é razoável pensar que uma perturbação suficientemente fraca não gere grandes desvios do comportamento no equilíbrio. Portanto, precisamos determinar que condições devem ser satisfeitas pelo sistema, de maneira que a solução $\rho(Q, P, t)$ possa ser escrita em termos da sua forma no equilíbrio. Para isso, podemos escrever a função distribuição em termos de sua expansão em série

de Taylor em torno de t_0

$$\rho(t) = \rho(t_0) + \frac{\partial \rho}{\partial t}(t_0)(s - t_0) + \dots, \quad (2.34)$$

e substituir a equação (2.34) na integral no tempo da equação (2.32), para obter

$$\int_{t_0}^t e^{i(t-s)L_0} L_I(s) \rho(s) ds = \int_{t_0}^t e^{i(t-s)L_0} L_I(s) \left[\rho(t_0) + \frac{\partial \rho}{\partial t}(t_0)(s - t_0) + \dots \right] ds. \quad (2.35)$$

Com o auxílio da equação (2.30), o lado direito da equação (2.35) pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t e^{i(t-s)L_0} L_I(s) \rho(s) ds &= \int_{t_0}^t e^{i(t-s)L_0} L_I(s) \rho(t_0) ds \\ &+ \int_{t_0}^t e^{i(t-s)L_0} L_I(s) [iL_0 \rho(t_0) + iL_I(t_0) \rho(t_0)] (s - t_0) ds + \dots \end{aligned}$$

Considerando o termo perturbativo suficientemente fraco, podemos tomar apenas os termos lineares em L_I e assim, para intervalos suficientemente curtos, teremos, então

$$\int_{t_0}^t e^{i(t-s)L_0} L_I(s) \rho(s) ds \approx \int_{t_0}^t e^{i(t-s)L_0} L_I(s) \rho(t_0) ds.$$

É justamente a manutenção dos termos lineares em L_I , provenientes da hipótese de interação fraca, que justifica e nomeia a **Teoria de Resposta Linear**. Portanto, a princípio, seria válida somente dentro dos intervalos de tempo onde a aproximação linear fosse válida, logo restrita a intervalos suficientemente curtos. Cabe, neste ponto a pergunta: a Teoria de Resposta Linear poderia ser aplicada para descrição de processos a tempos longos? A resposta para esta pergunta é **sim**. Para isto, basta olharmos para o comportamento da distribuição de Liouville a tempos longos. De fato, se a perturbação for suficientemente fraca, de modo que a distribuição de equilíbrio praticamente não varie no tempo, teremos $(\frac{\partial \rho}{\partial t}(t_0) = \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2}(t_0) = \dots = 0)$, e a expressão $\rho(t) \approx \rho(t_0)$ é uma boa aproximação inclusive para tempos longos. Portanto, em qualquer um dos casos, aproximação de tempos curtos ou de invariância de ρ , podemos escrever⁴

$$\int_{t_0}^t e^{i(t-s)L_0} L_I(s) \rho(s) ds \approx \int_{t_0}^t e^{i(t-s)L_0} L_I(s) \rho(t_0) ds.$$

⁴Deve ficar claro que, ambas aproximações serão válidas somente no regime de perturbações fracas, ou seja, quando os termos lineares em L_I são dominantes.

Daí, resulta que

$$\begin{aligned}\rho(Q, P, t) &= \rho_e(Q, P) + \int_{t_0}^t e^{i(t-s)L_0} iL_I(s)\rho(t_0)ds \\ &= \rho_e(Q, P) + \int_{t_0}^t e^{i(t-s)L_0} \{H_I(s), \rho_e(Q, P)\} ds.\end{aligned}$$

Substituindo a distribuição $\rho(Q, P, t)$ acima em (2.33), finalmente obtemos

$$\langle B(Q, P) \rangle(t) = \langle B(Q, P) \rangle_e + \iint_{t_0}^t B(Q, P) e^{i(t-s)L_0} \{H_I(s), \rho_e(Q, P)\} dQdPds. \quad (2.36)$$

Chegamos, enfim, a uma expressão para $\langle B(Q, P) \rangle(t)$ em termos da distribuição inicial de equilíbrio $\rho_e = \rho(t_0)$. Um ponto importante deve ser ressaltado para que, futuramente, evitemos algumas confusões. Em [35], Kubo define a distribuição de equilíbrio como sendo aquela que permite estabelecer uma temperatura ao sistema. Por motivos que ficarão evidentes no capítulo 4 relaxaremos essa condição de equilíbrio para uma condição inicial onde os membros do banho não interagem entre si. Oportunamente, retornaremos a esta questão.

Concentraremos nossos esforços no termo perturbativo da equação (2.36). Como $H_I(t) = -A(Q, P)\chi(t)$ então

$$\{H_I(s), \rho_e(Q, P)\} = \{-A(Q, P), \rho_e(Q, P)\} \chi(s). \quad (2.37)$$

Substituindo (2.37) em (2.36) temos

$$\begin{aligned}\langle B(Q, P) \rangle(t) &= \int B(Q, P)\rho_e(Q, P)dQdP + \iint_{t_0}^t B(Q, P)e^{i(t-s)L_0} \{-A(Q, P), \rho_e(Q, P)\} \chi(s)dQdPds \\ &= \int B(Q, P)\rho_e(Q, P)dQdP + \int_{t_0}^t \phi_{BA}(t-s)\chi(s)ds,\end{aligned} \quad (2.38)$$

onde

$$\phi_{BA}(t-s) = \int B(Q, P)e^{i(t-s)L_0} \{-A(Q, P), \rho_e(Q, P)\} dQdP \quad (2.39)$$

é denominada a **Função Resposta** da grandeza $B(Q, P)$ associada a fonte perturbadora $A(Q, P)$. Expandindo o Parênteses de Poisson na integral acima, temos

$$\begin{aligned}\phi_{BA}(t-s) &= \int B(Q, P)e^{i(t-s)L_0} \{-A(Q, P), \rho_e(Q, P)\} dQdP \\ &= \int B(Q, P)e^{i(t-s)L_0} \frac{\partial \rho_e}{\partial Q} \frac{\partial A}{\partial P} dQdP - \int B(Q, P)e^{i(t-s)L_0} \frac{\partial \rho_e}{\partial P} \frac{\partial A}{\partial Q} dQdP.\end{aligned}$$

Se integrarmos por partes, cada uma das integrais, obtemos

$$\begin{aligned}\phi_{BA}(t-s) &= \int \frac{\partial A}{\partial P} \left(\rho_e B e^{i(t-s)L_0} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int \rho_e \frac{\partial(B e^{i(t-s)L_0})}{\partial Q} dQ \right) dP \\ &\quad - \int \frac{\partial A}{\partial Q} \left(\rho_e B e^{i(t-s)L_0} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int \rho_e \frac{\partial(B e^{i(t-s)L_0})}{\partial P} dP \right) dQ.\end{aligned}$$

Identificando $B e^{i(t-s)L_0} = B(t-s)$ e utilizando o fato de que $\rho_e(Q, P) \rightarrow 0$ quando $Q, P \rightarrow \infty$ encontramos, finalmente,

$$\begin{aligned}\phi_{BA}(t-s) &= \left[\int \rho_e \frac{\partial A}{\partial P} \frac{\partial B(t-s)}{\partial Q} dQ dP - \int \rho_e \frac{\partial A}{\partial Q} \frac{\partial B(t-s)}{\partial P} dQ dP \right] \\ &= \int \rho_e \{A, B(t-s)\} dQ dP \\ &= \int \rho_e \{A(Q, P), B(Q(t-s), P(t-s))\} dQ dP,\end{aligned}$$

ou seja,

$$\phi_{BA}(t-s) = \langle \{A(Q, P), B(Q(t-s), P(t-s))\} \rangle_{eq} = \langle \{A(Q(t), P(t)), B(Q(s), P(s))\} \rangle_{eq}. \quad (2.40)$$

Portanto, podemos, finalmente, escrever

$$\langle B(Q, P) \rangle(t) = \langle B(Q(t), P(t)) \rangle_e + \int_{t_0}^t \phi_{BA}(t-s) \chi(s) ds, \quad (2.41)$$

onde $\phi_{BA}(t-s)$ é dada pela equação (2.40).

Note, que no regime de perturbações fracas, a evolução temporal de qualquer grandeza associada às variáveis (Q, P) , pode ser escrita como a soma do seu valor no equilíbrio com o termo de correção obtido a partir da função resposta do sistema. Além disso, $\phi_{BA}(t-s)$, dada pela equação (2.40) é, justamente, o que chamamos de susceptibilidade dinâmica retardada do sistema (eq. (2.20)), no modelo Caldeira-Leggett. A função $\phi_{BA}(t-s)$ também é utilizada dentro da demonstração do Teorema Flutuação-Dissipação (TFD), cuja demonstração simplificada pode ser vista no Apêndice A. Em linhas gerais, para demonstrarmos o TFD tomamos apenas uma parte da função resposta total e, assim, conseguimos estabelecer um relação entre a resposta do sistema e sua função de correlação dinâmica.

2.5.1 Teoria da Resposta Linear aplicada a um banho de osciladores harmônicos

Para exemplificar o fato de que a teoria de resposta linear fornece a resposta exata quando o sistema em que se aplica possui dinâmica microscópica linear, aplicaremos a TRL a um banho de osciladores harmônicos perturbados por uma força externa $F(t)$. O hamiltoniano do sistema pode ser escrito como

$$H = H_0 + H_I = \sum_{i=1}^N \left[\frac{P_i^2}{2m} + \frac{m_i \omega_i^2 x_i^2}{2} \right] + \sum_{i=1}^N x_i F(t).$$

Desejamos analisar o comportamento da variável “macroscópica” $X(t) = \sum_{i=1}^N x_i(t)$ via teoria de resposta linear. Vamos supor que, inicialmente, os N membros do banho estão desacoplados e que obedecem à distribuição de energia

$$\rho_e = \frac{\delta(H_{c_1} - E_{c_1}) \delta(H_{c_2} - E_{c_2}) \cdots \delta(H_{c_N} - E_{c_N})}{\int \prod_{i=1}^N \delta(H_{c_i} - E_{c_i}) \prod_{i=1}^N dx_i dp_i} = \frac{1}{Z} \prod_{k=1}^N \delta(H_{c_k} - E_{c_k}).$$

Fazendo a associação

$$A(r, t) = \sum_{i=1}^N x_i(t) \text{ e } B(r, s) = \sum_{i=1}^N x_i(s)$$

e usando a equação (2.41) temos que

$$\langle X(t) \rangle = \langle X(t) \rangle_e + \int_0^t \phi_{XX}(t-s) F(s) ds,$$

onde $\langle X(t) \rangle_e$ é o valor médio da soma das trajetórias individuais dos osciladores no equilíbrio (eq. (2.42), abaixo). Já a função resposta do sistema é dada por

$$\Phi_{XX}(t-s) = \left\langle \left\{ \sum_{i=1}^N x_i(t), \sum_{j=1}^N x_j(s) \right\} \right\rangle_e = \int \rho_e \left\{ \sum_{i=1}^N x_i(t), \sum_{j=1}^N x_j(s) \right\} \prod_{k=1}^N dx_k dp_k.$$

Como os N sistemas estão desacoplados, sabemos suas soluções no equilíbrio. Elas são dadas por

$$x_i^{(e)}(t) = x_i(0) \cos \omega_i t + \frac{P_i(0)}{m_i \omega_i} \sin \omega_i t. \quad (2.42)$$

Daí

$$\begin{aligned}
\Phi_{XX}(t-s) &= \left\langle \sum_{k=1}^N \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial x_i^{(e)}(t)}{\partial x_k(0)} \frac{\partial x_j^{(e)}(s)}{\partial p_k(0)} - \frac{\partial x_i^{(e)}(s)}{\partial p_k(0)} \frac{\partial x_j^{(e)}(t)}{\partial x_k(0)} \right) \right\rangle_e \\
&= \left\langle \sum_{k=1}^N \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left(\delta_{ik} \cos \omega_i t \frac{\delta_{jk}}{m_j \omega_j} \sin \omega_j s - \frac{\delta_{ik}}{m_i \omega_i} \sin \omega_i s \delta_{jk} \cos \omega_j t \right) \right\rangle_e \\
&= - \left\langle \sum_{k=1}^N \frac{1}{m_j \omega_j} (\sin \omega_k t \cos \omega_k s - \sin \omega_k s \cos \omega_k t) \right\rangle_e \\
&= - \left\langle \sum_{k=1}^N \frac{1}{m_j \omega_j} \sin \omega_k (t-s) \right\rangle_e = \left[\sum_{k=1}^N \frac{1}{m_j \omega_j} \sin \omega_k (t-s) \right] \frac{1}{Z} \int \prod_{i=1}^N \delta(H_{c_i} - E_{c_i}) \prod_{i=1}^N dx_i dp_i \\
&= \sum_{k=1}^N \frac{1}{m_j \omega_j} \sin \omega_k (t-s).
\end{aligned}$$

Assim, podemos escrever

$$\begin{aligned}
\langle X(t) \rangle &= \langle X(t) \rangle_e + \int_0^t \phi_{XX}(t-s) F(s) ds, \\
&= \langle X(t) \rangle_e - \int_0^t \left[\sum_{k=1}^N \frac{1}{m_j \omega_j} \sin \omega_k (t-s) \right] F(s) ds.
\end{aligned} \tag{2.43}$$

Comparando a eq. (2.43) com a (2.8), obtida de forma exata, mostramos que a TRL fornece a resposta completa para o banho de osciladores harmônicos, cuja dinâmica de equilíbrio é linear.

2.6 Considerações finais

Neste capítulo dedicamos algum tempo debruçados sobre dois dos modelos dissipativos mais importantes: a partícula Browniana e o modelo Caldeira-Leggett. Em ambos, vimos que o ambiente atua como um meio viscoso gerando uma força flutuante que, sob hipóteses adequadas, atua como um ruído branco. No primeiro, porém, a modelagem é fenomenológica e não podemos obter muita informação sobre a dinâmica microscópica do meio. No segundo, por outro lado, admite-se que a dinâmica do meio é regular (osciladores harmônicos) e após algumas hipóteses sobre a natureza do banho (distribuição linear de frequências e limite termodinâmico), verifica-se sua eficiência como meio dissipativo. Em outras palavras, mesmo no regime integrável, onde as correlações temporais de cada trajetória não se anulam, o efeito macroscópico de distribuir linearmente as frequências no limite contínuo simula a ação de uma constante de arrasto e uma força flutuante delta-correlacionada. Portanto, uma parte

da resposta acerca da influência do regime dinâmico do banho sobre a evolução temporal do sistema de interesse foi dada. A outra parte da resposta foi dada por Wilkinson [15], ao dizer que a presença do caos aumenta a eficiência do meio dissipativo. No entanto, nenhum dos modelos descritos neste capítulo foi capaz de responder a seguinte questão:

Quais condições devem ser impostas ao banho, com relação ao número de graus de liberdade e ao regime dinâmico, para que seja possível a dissipação efetiva, ou seja, para que ocorra fluxo irreversível de energia do sistema de interesse para o ambiente numa única trajetória global do sistema?

Os capítulos 3 e 4, a seguir, nos conduzirão rumo a esta resposta.

Capítulo 3

O tratamento numérico

“We adore chaos because we love to produce order”

M.C. Escher

Como vimos nos Capítulos 1 e 2, existem algumas questões importantes que precisam ser respondidas para uma melhor compreensão dos processos dissipativos, principalmente, aqueles que envolvem o acoplamento de um sistema de interesse com um banho composto por um conjunto finito de graus de liberdade. O modelo Caldeira-Leggett [12], visto resumidamente na seção 2.3, não pertence a esta classe de sistemas, uma vez que o comportamento dissipativo ocorre, somente, quando escrevemos uma distribuição contínua de frequências para o banho por meio da função espectral (2.24). Na prática, isto é equivalente a tomar o limite termodinâmico, estabelecendo, portanto, um reservatório com infinitos graus de liberdade.

Nas últimas décadas, tornou-se crescente o interesse por banhos caóticos de baixa dimensionalidade. Nestes tipos de sistemas, as flutuações dinâmicas são significativamente grandes, de forma que a dissipação somente pode ser verificada quando efetuam-se médias sobre diversas realizações. Isto é uma consequência direta do pequeno número graus de liberdade envolvidos. No próprio conceito de dissipação, como definido por Wilkinson [15]:

“O mecanismo da dissipação, a conversão irreversível de trabalho em calor, consiste na transferência de energia de um pequeno número de graus de liberdade observáveis (sistema macroscópico) para um grande número de graus de liberdade não observáveis (sistema microscópico)”

vemos que o “tamanho” do ambiente é um parâmetro importante no problema. Tendo isto em vista, o único ponto impreciso da definição acima é não sabermos o quão “grande” deve ser o sistema microscópico para que a dissipação ocorra sem necessidade de médias. Na verdade, como vimos na seção

2.4, Wilkinson e, posteriormente, Berry e Robbins [16], não respondem precisamente a esta pergunta, uma vez que seus trabalhos estão relacionados ao estudo do acoplamento entre o sistema de interesse e o banho caótico por meio das propriedades dos invariantes adiabáticos, onde a dinâmica do ambiente externo é descrita por uma variável macroscópica. No entanto, a confirmação de que o caos aumenta a eficiência do ambiente dissipativo fez crescer o número de trabalhos cujo o banho é formado por sistemas caóticos de baixa dimensão num contexto clássico [20, 21, 6, 13, 14] e num contexto quântico [22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32]. Todos estes trabalhos mostram que, para o caso de banhos muito pequenos (com aproximadamente dois graus de liberdade), não é possível verificar a dissipação efetiva, sendo necessárias a realização de médias no *ensemble*.

Embora o estudo da dissipação, via média de *ensemble*, para sistemas de baixa dimensão tenha produzido muitos resultados interessantes, ele não descreve o comportamento de sistemas reais onde somente uma realização ocorre, ou seja, onde a utilização de médias é artificial. Estamos cercados de inúmeros exemplos deste tipo de sistema dissipativo: objetos macroscópicos sob a ação de forças de atrito, troca de calor entre reservatórios térmicos a diferentes temperaturas, reações moleculares etc. No entanto, dos três exemplos citados, talvez somente o último se enquadre no perfil do problema que estudaremos nesta tese, onde o número de graus de liberdade microscópicos do ambiente é finito, relativamente pequeno e nenhuma média sobre as diferentes realizações é efetuada. Devemos ter em mente que utilizaremos o termo *efetivo* com o intuito de diferenciar estes processos dissipativos daqueles obtidos a partir de médias. Desta maneira, o termo *dissipação efetiva*, por exemplo, significa a perda irreversível de energia a partir da dinâmica de uma única trajetória global do sistema.

3.1 Estrutura geral

Seguindo a linha de Wilkinson [15], nos referiremos ao sistema macroscópico, com poucos graus de liberdade, como **Sistema Central**, enquanto que o sistema microscópico será denominado **Sistema Externo**. Estamos interessados em analisar os efeitos gerados pelo acoplamento dos múltiplos graus de liberdade do sistema externo sobre a dinâmica do sistema central. A figura 3.1 ilustra nossa nomenclatura.

Em linhas gerais, o Hamiltoniano do sistema completo segue o esquema proposto por Feynman e Vernon [5] e pode ser escrito como

$$H = H_O + H_E + \lambda_N H_I, \quad (3.1)$$

onde H_O , $H_E = \sum_{n=1}^N H_E^{(n)}$ e H_I são os Hamiltonianos do sistema central, do sistema externo e de interação, respectivamente. Note que o sistema externo é, na verdade, uma soma finita de Hamiltonianos,

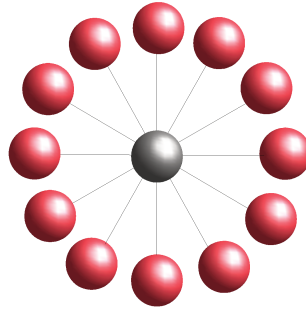


Figura 3.1: Esquema geral que justifica a nossa nomenclatura. A distância do sistema central a cada um dos sistemas externos representa a intensidade do acoplamento λ_N .

portanto, o valor de N será um parâmetro relevante neste trabalho. O índice “ N ” atrelado à constante de acoplamento (λ) evidencia sua dependência com o “tamanho” do ambiente.

Nesta tese, o sistema central é um oscilador harmônico de frequência ω_o e, por isso, não nos preocuparemos em discriminar suas propriedades. Na próxima seção apresentaremos os membros que compõem o sistema externo, detalhando algumas de suas principais características que justificam sua escolha.

3.2 O Potencial Quártico

O sistema escolhido para compor o nosso banho é o conhecido Potencial Quártico [36], cuja Hamiltoniana é dada por

$$H_Q = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2} + \frac{a}{4}(x^4 + y^4) + \frac{x^2 y^2}{2}. \quad (3.2)$$

Este é um sistema Hamiltoniano fechado, de dois graus de liberdade, no qual a caoticidade está relacionada, exclusivamente, ao parâmetro a . Note que, para $a = 1$, o sistema é integrável pois

$$H_Q = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2} + \frac{1}{4}(x^2 + y^2)^2 = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \frac{\mathbf{r}^4}{4}.$$

e o momento angular $L_z = xp_y - yp_x = r^2\dot{\theta}$ é conservado. Em contrapartida, a medida que o valor de a diminui, o termo cruzado $x^2 y^2$ torna-se cada vez mais relevante dentro do Hamiltoniano e o sistema afasta-se gradativamente do regime integrável, sendo conduzido ao regime caótico. Com isso, a projeção no plano xy do espaço de fases, que para $a = 1$ assemelha-se a uma elipse, é esticada nos sentidos positivo e negativo das direções x e y , formando uma figura que nos lembra uma estrela de quatro pontas no limite $a \rightarrow 0$ (ver fig. 3.2).

Na verdade, a Figura 3.2 apenas ilustra os efeitos topológicos no espaço de fase causados pela

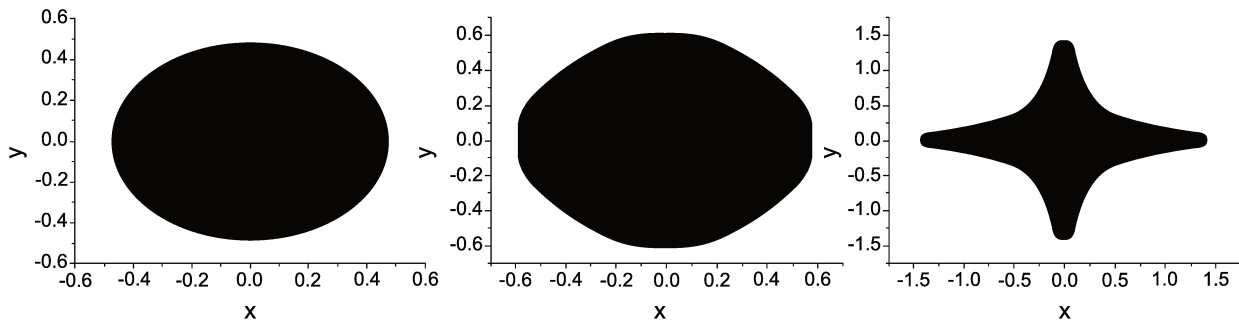


Figura 3.2: Projção no plano xy do espaço de fases do Potencial Quártico para: (a) $a = 1.0$; (b) $a = 0.5$; (c) $a = 0.01$.

variação do parâmetro a . A verificação de que o regime dinâmico é realmente alterado, pode ser feita pela análise da Fig.3.3, que mostra as seções de Poincaré para três valores de a . Quando $a = 1$, Fig.3.3-a, podemos notar que o espaço de fases é constituído apenas por órbitas periódicas, o que caracteriza um regime dinâmico *integrável*. Para $a = 0.5$, Fig.3.3-b, verificamos a existência de ilhas de movimento regular, rodeadas por regiões densamente preenchidas, caracterizando a presença de caos. A este regime denominaremos *misto*. Por fim, para $a = 0.01$, Fig. 3.3-c, as ilhas de estabilidade foram destruídas¹ e o movimento caótico está presente em praticamente todo espaço de fases e por esta razão chamaremos este de *regime caótico*.

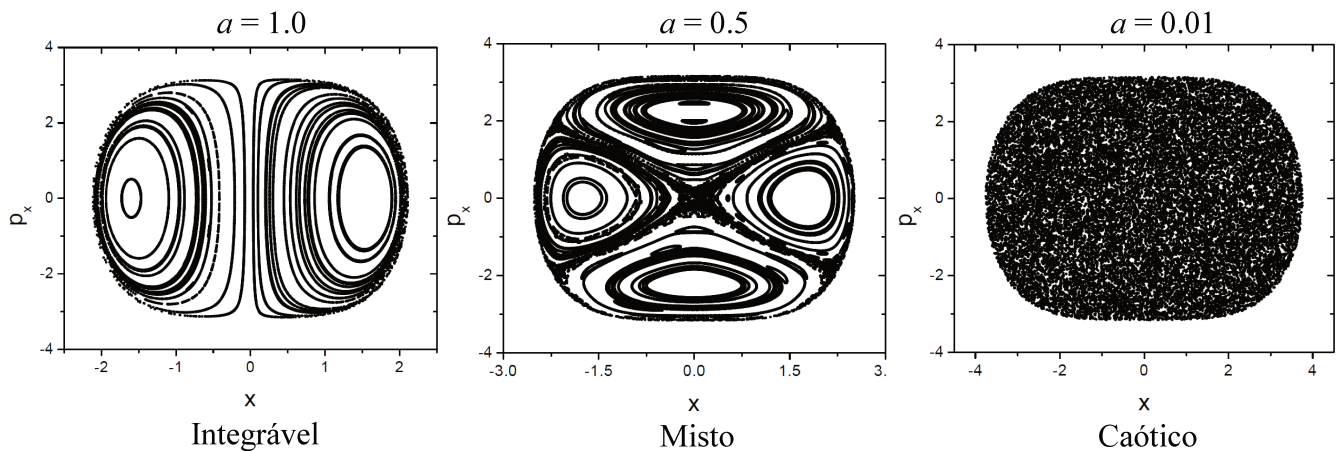


Figura 3.3: Seções de Poincaré do Potencial Quártico.

Praticamente todos os resultados numéricos deste trabalho estão associados a um dos três regimes dinâmicos citados acima. Por isso, os destacamos na Tabela 3.1.

¹Na verdade, no limite $a \rightarrow 0$, o sistema não é totalmente hiperbólico. Por exemplo, Dahlqvist e Russberg mostram, em [37], a existência de uma órbita periódica estável para $a = 0$.

Regime Dinâmico	a
Integrável	1.0
Misto	0.5
Caótico	0.01

Tabela 3.1: Regimes dinâmicos estudados nos resultados numéricos.

No início desta seção afirmamos que a caoticidade está associada exclusivamente ao parâmetro a , mas o que fizemos até agora, foi mostrar que a contribui para o surgimento de caos e ainda não nos referimos ao papel da energia do sistema sobre seu comportamento dinâmico. Existem sistemas, como, por exemplo, o Potencial Nelson [38], para os quais a energia atua como um parâmetro de caoticidade. A seção seguinte nos mostrará que este não é o caso para o Sistema Quártico.

3.2.1 A propriedade de reescala

O controle do regime dinâmico do Sistema Quártico está associado unicamente ao parâmetro a porque o SQ é, na verdade, reescalável com a energia [36]. Isto significa que, dadas as coordenadas, os momentos, o período ou, até mesmo a ação para uma dada energia E_0 , podemos encontrar esses mesmos parâmetros, para uma outra energia E qualquer, através de uma simples transformação de escala. De fato, os fatores de reescala são dados por

$$p_{(x,y)}(t') = \left(\frac{E}{E_0}\right)^{1/2} p_{(x_0,y_0)}(t), \quad (3.3)$$

$$\begin{Bmatrix} x \\ y \end{Bmatrix} (t') = \left(\frac{E}{E_0}\right)^{1/4} \begin{Bmatrix} x_0 \\ y_0 \end{Bmatrix} (t), \quad (3.4)$$

$$t' = \left(\frac{E}{E_0}\right)^{-1/2} t, \quad (3.5)$$

$$S(E) = \left(\frac{E}{E_0}\right)^{3/4} S(E_0). \quad (3.6)$$

As expressões (3.3), (3.4) e (3.5) nos dizem que, dependendo da razão (E/E_0) o espaço de fases é “comprimido” ou “inflado” (Fig.3.4), enquanto que a escala temporal é “dilatada” ou “contraída” (Fig.3.5).

A propriedade de reescala do Potencial Quártico é extremamente importante neste trabalho, uma vez que nos permite ajustar a “velocidade relativa” entre os dois subsistemas que compõem o sistema completo. O ajuste da “velocidade relativa” consiste em estabelecer um regime no qual a dinâmica do

sistema de interesse, no nosso caso um Oscilador Harmônico (OH), seja suficientemente lenta quando comparada com a dinâmica dos membros do banho. Em outras palavras, impomos a hipótese de adiabaticidade. Esta condição é importante pois, como poderemos verificar, analisando a equação (4.2), que rege o comportamento do oscilador harmônico, o acoplamento via coordenadas simula a ação de uma força externa. Por isso, quanto mais rápida for a dinâmica dos membros do banho, mais próxima de uma força flutuante será a ação do termo de acoplamento. Além disso, a propriedade de reescala tornará possível o cálculo das funções de correlação dinâmica do SQ, objeto central na descrição da dissipação via Teoria de Resposta Linear no Capítulo 4.

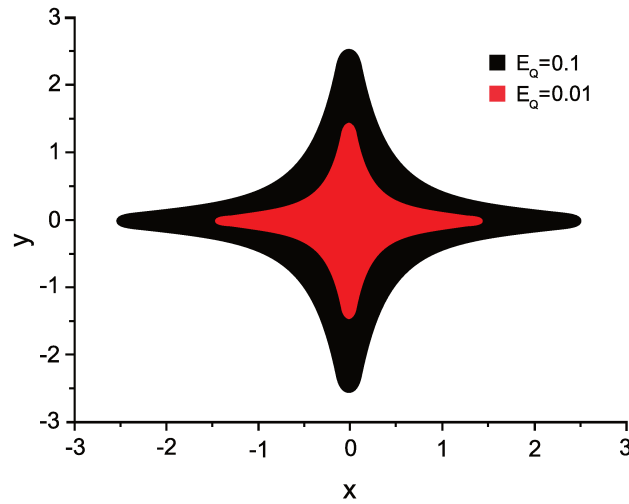


Figura 3.4: Projeção no plano xy do espaço de fases do Sistema Quártico para dois valores distintos da energia do sistema. Quanto maior a energia do sistema, maior é o volume do espaço de fases.

Tendo sido explicitadas as propriedades do Sistema Quártico relevantes para este trabalho, podemos avançar rumo aos principais resultados numéricos desta tese. Para mais detalhes sobre o Sistema Quártico, pode-se consultar os trabalhos [36, 39].

3.3 Dissipação efetiva via acoplamento com um banho caótico finito.

Os principais objetivos desta tese, como destacamos anteriormente, são estudar o papel que tanto o regime dinâmico, quanto o número de graus de liberdade presentes no ambiente desempenham no processo de dissipação efetiva do sistema central. Para isso, mostraremos nesta seção os resultados numéricos obtidos utilizando um integrador numérico Runge-Kutta de passo variável. Começaremos

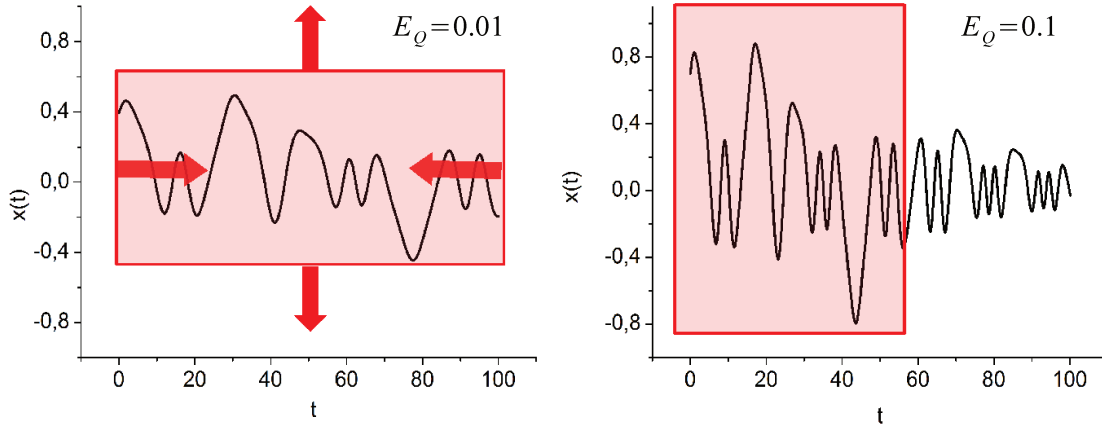


Figura 3.5: A propriedade de reescala do tempo vista a partir da evolução temporal da coordenada x do Sistema Quártico, para dois valores distintos de energia. É importante ressaltar que as outras variáveis também são reescaladas de acordo com as equações 3.3 e 3.4.

definindo a Hamiltoniana do problema, fixando as condições iniciais e, em seguida, mostraremos uma série de resultados associados à evolução temporal do sistema completo em diversos regimes dinâmicos.

O nosso sistema central é um oscilador harmônico de massa m e frequência ω_0 , acoplado com uma soma finita de Sistemas Quárticos (SQ), dados pela equação (3.2). Como vimos na seção 3.2, podemos controlar o regime dinâmico do ambiente externo variando o parâmetro a . Por isso, se fixarmos o número (N) de sistemas constituintes do reservatório, podemos investigar o papel do regime dinâmico na evolução temporal do sistema de interesse. Por outro lado, fixando o parâmetro a e variando N , somos capazes de analisar o quanto o número de graus de liberdade influencia nas propriedades dinâmicas do oscilador harmônico. O Hamiltoniano completo do sistema é dado por

$$H = H_O + H_E + \lambda_N H_I \quad (3.7)$$

onde,

$$H_O = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2 q^2}{2},$$

$$H_E = \sum_{n=1}^N \left[\frac{p_{x_n}^2 + p_{y_n}^2}{2} + \frac{a}{4}(x_n^4 + y_n^4) + \frac{x_n^2 y_n^2}{2} \right],$$

e

$$H_I = \sum_{n=1}^N qx_n,$$

são os Hamiltonianos do oscilador, do sistema externo e de interação, respectivamente. Note que o termo de acoplamento é bilinear nas coordenadas do oscilador e de cada membro do banho. A grande diferença entre os Hamiltonianos 3.7 e o estudado por Bonança em [6, 40], onde $N = 1$, é o fato de haver interação indireta entre cada um dos sistemas quárticos, mediada pelo acoplamento individual com o sistema central. Além disso, existe outra diferença. Como desejamos comparar os resultados para diferentes valores de N , existe a necessidade de reescalarmos a constante de acoplamento $\lambda_N = \lambda/\sqrt{N}$ de acordo com o “tamanho” do ambiente. Na verdade, esta reescala impede a divergência da energia de interação e nos permite obter, como veremos, um regime em que a dinâmica do sistema independe de N para N grande. No Capítulo 4, seção 4.2, justificamos a forma de λ_N .

Na próxima seção fixaremos quais tipos de condições iniciais serão adotadas para o estudo do comportamento dinâmico do sistema.

3.3.1 As condições iniciais

Deve sempre ficar claro que o intuito deste capítulo, é estudar a evolução temporal de uma única trajetória global do sistema. Para isso escolhemos dois tipos de condições iniciais globais, sendo que em ambas, fixamos a energia do oscilador harmônico (E_o) com $q(0) = 0$ e $p(0) = \sqrt{2mE_o}$. A distribuição de energia do banho em $t = 0$ é sempre dada por

$$\rho = \frac{1}{Z} \prod_{n=1}^N \delta(H_Q^{(n)} - E_Q^{(n)}), \quad (3.8)$$

onde $E_Q^{(n)}$ são as energias de cada membro do sistema externo. Logo, o banho é composto por N sistemas não interagentes em $t = 0$. Na primeira forma de inicialização, todos os elementos do banho possuem mesma energia $E_Q^{(n)} = E_Q$, $n = 1, \dots, N$ e as condições iniciais são distribuídas aleatoriamente sobre a mesma superfície de energia. A esta distribuição, denominaremos *pseudo-microcanônica*, para diferenciá-la da distribuição microcanônica real, que é uniforme sobre a superfície de energia de todos os N sistemas quárticos.

No segundo tipo de inicialização, escolhemos as energias de cada sistema quártico segundo a distri-

buição de probabilidade (distribuição de Boltzmann)

$$p(E) = \frac{1}{E_Q} e^{-\frac{E}{k_B T}}. \quad (3.9)$$

Desta maneira, em $t = 0$, cada elemento do banho tem suas condições iniciais distribuídas aleatoriamente na superfície de energia escolhida, usando (3.9) e, assim, podemos esboçar uma temperatura inicial associada ao sistema externo, identificando T com a energia média dos elementos do banho, a partir da expressão $k_B T \equiv \bar{E}_Q$. Portanto, ao vincularmos a escolha das energias individuais $E_Q^{(n)}$ de (3.8) com a distribuição (3.9), construímos um ambiente externo que faz uma mímica de um reservatório térmico em $t = 0$ e, por esta razão, chamaremos esta segunda forma de inicialização de distribuição *pseudo-canônica*.

A aleatoriedade das condições iniciais é obtida a partir da escolha randômica das variáveis θ_n , ξ_n e φ_n da parametrização especial [6, 40] do Hamiltoniano (3.2), dadas pelas equações

$$x_n^2 = \sqrt{\frac{2H_Q^{(n)}}{\cos 2\theta_n} \left[\frac{\cos \theta_n}{\sqrt{1+a}} + \frac{\sin \theta_n}{\sqrt{1-a}} \right]} \sin \xi_n, \quad (3.10)$$

$$y_n^2 = \sqrt{\frac{2H_Q^{(n)}}{\cos 2\theta_n} \left[\frac{\cos \theta_n}{\sqrt{1+a}} - \frac{\sin \theta_n}{\sqrt{1-a}} \right]} \sin \xi_n, \quad (3.11)$$

$$p_{x_n} = \sqrt{2H_Q^{(n)}} \cos \varphi_n \cos \xi_n, \quad (3.12)$$

$$p_{y_n} = \sqrt{2H_Q^{(n)}} \sin \varphi_n \cos \xi_n, \quad (3.13)$$

onde $0 < \theta_n \leq \theta_0 < \pi/4$, $0 \leq \xi_n \leq \pi/2$ e $0 \leq \varphi_n \leq 2\pi$, com $\tan \theta_n = \sqrt{(1-a)/(1+a)}$.

Cabe salientar que, no caso da distribuição *pseudo-microcanônica*, a distribuição randômica das condições iniciais (ver fig. 3.6), a partir das equações (3.10) a (3.11) é fundamental, pois do contrário, teríamos um banho composto por N elementos absolutamente idênticos e os resultados seriam aproximadamente os mesmos do que os obtidos para um único sistema no banho.

As restrições impostas às variáveis θ_n , ξ_n e φ_n , não nos permitem preencher completamente o espaço de fases do Sistema Quártico, como pode ser visto na fig.3.7. No entanto, isto não nos conduz a qualquer problema, visto que o intuito é a construção de um ambiente externo finito e que a dinâmica é avaliada em termos efetivos, ou seja, sem a realização de qualquer média, onde, a princípio, a restrição do espaço de fases poderia gerar algum tipo de complicação. Portanto, a parametrização dentro do tratamento numérico tem o papel de introduzir a aleatoriedade das trajetórias do banho, garantindo um maior acesso a diferentes regiões do espaço de fases do potencial quártico (ver fig. 3.6).

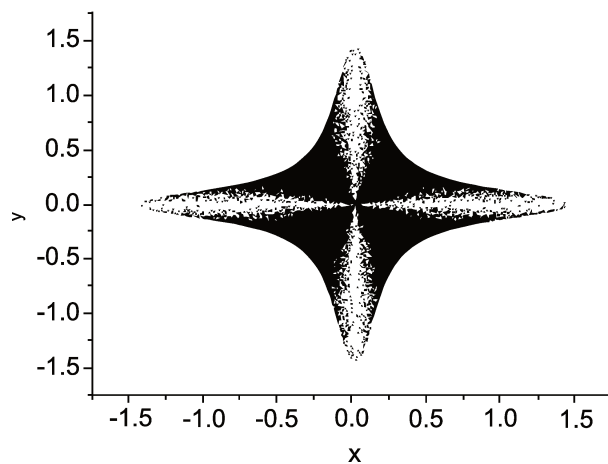


Figura 3.6: Duas trajetórias geradas a partir da escolha randômica das variáveis angulares θ_n , ξ_n e φ_n , para o caso em que a distribuição inicial é pseudo-microcanônica.

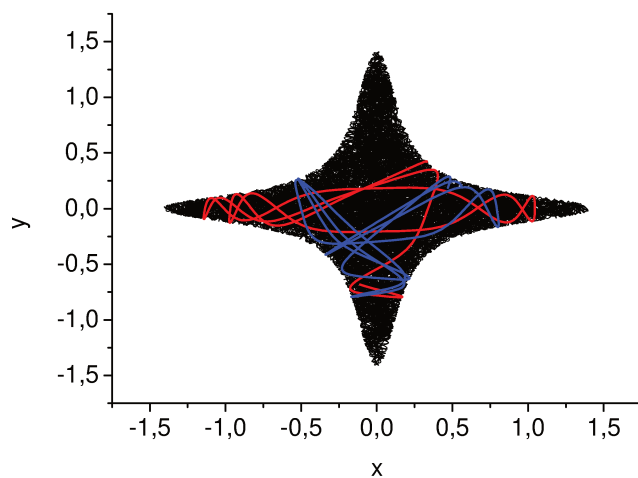


Figura 3.7: Porção do espaço de fase (plano xy) coberta pela parametrização (3.10) a (3.11).

Definida a maneira como fixamos nossas condições iniciais, estamos aptos para analisar a dinâmica efetiva global do sistema em seus diferentes regimes dinâmicos. Em praticamente todas as realizações numéricas deste trabalho, fixamos: $m = 1$ (massa do oscilador harmônico), $\omega_o = 0.3$ (frequência do oscilador harmônico) e $E_o = 10.0$ (energia inicial do oscilador harmônico). Os casos em que outros valores dos parâmetros acima forem utilizados serão devidamente notificados.

3.4 Resultados numéricos

Esta seção condensa os principais resultados sobre o papel do acoplamento entre o oscilador harmônico e um banho finito de sistemas quárticos (eq.3.7) obedecendo a distribuição *pseudo-microcanônica*². As duas primeiras subseções referem-se aos casos em que todos os elementos do banho possuem $a = 1.0$ (regime integrável) e $a = 0.5$ (regime misto), respectivamente. Em ambas, o objetivo é uma descrição apenas qualitativamente dos resultados.

O foco desta tese está centrado na influência do caos presente no banho sobre a dinâmica do sistema de interesse. Logo, as discussões mais profundas e pormenorizadas a respeito dos mecanismos que conduzem o sistema de interesse ao equilíbrio serão discutidos a partir da seção 3.4.3.

3.4.1 Banho no regime integrável ($a = 1.0$)

Ilustraremos aqui o comportamento geral do oscilador harmônico, quando acoplado a um ambiente composto por um número finito de sistemas quárticos, cuja dinâmica intrínseca é regular. O comportamento periódico das trajetórias individuais do banho não é capaz de estabelecer um ambiente dissipativo eficiente. A trajetória do sistema projetada no espaço de fases do oscilador é muito pouco alterada em relação ao caso desacoplado, como podemos ver na Fig. 3.8, e, em linhas gerais, muito pouca energia é transferida do oscilador para o banho (Fig.3.9), que mostra a energia média do oscilador após ter atingido o equilíbrio como função do número de sistemas presentes no banho.

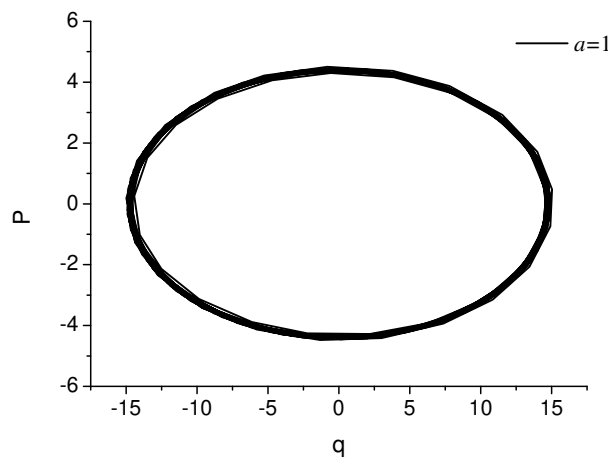


Figura 3.8: Trajetória do oscilador no seu espaço de fase. Neste caso, o banho contém 100 sistemas quárticos no regime integrável.

²Os resultados referentes à dinâmica efetiva e à análise das distribuições de equilíbrio do sistema são qualitativamente idênticas, tanto para o ensemble *pseudo-microcanônico* como para o *pseudo-canônico*. Nesta seção escolhemos o primeiro para mais adiante, na seção em que aplicamos a Teoria de Resposta Linear, justificarmos a necessidade do segundo.

Isto pode ser verificado, inclusive, para valores relativamente grandes de N . A fig.3.9 nos mostra, ainda, que a energia média no equilíbrio do oscilador harmônico decresce muito lentamente a medida que N aumenta. Portanto, o sistema quártico não pode ser utilizado para comparação direta com o modelo Caldeira-Leggett, composto por osciladores harmônicos[12]. Embora em ambos os modelos, o banho seja formado por sistemas obedecendo a uma dinâmica regular, nosso modelo não é capaz de introduzir um ingrediente fundamental do modelo CL, a distribuição espectral de frequências, eq.(2.24). No nosso caso, não importa qual distribuição inicial utilizemos (*pseudo-microcanônica* ou *pseudo-canônica*) todos os elementos do sistema externo são idênticos, a menos das mudanças de escala (3.3), (3.4) e (3.5).

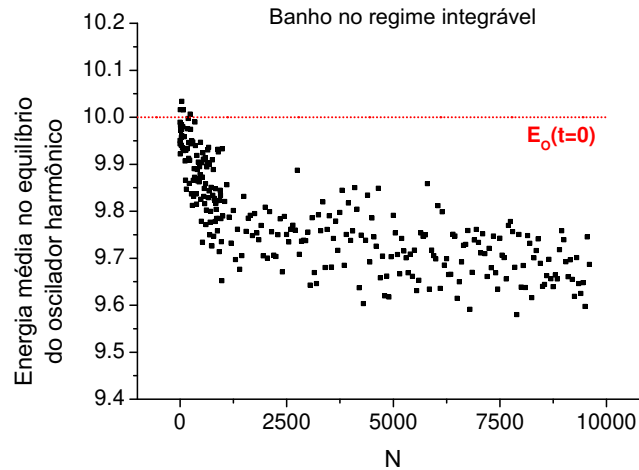


Figura 3.9: Energia média do oscilador harmônico no equilíbrio como função do número de sistemas N .

3.4.2 Banho no regime misto ($a = 0.5$)

No caso intermediário, podemos ver, a partir do mapa de Poincaré da figura 3.3, que existem tanto regiões de dinâmica regular, quanto regiões de dinâmica caótica. No entanto, a presença de caos no banho não é capaz de promover uma mudança significativa no fluxo de energia entre os sistemas central e externo. Boa parte das trajetórias dos sistemas quárticos deve estar associada às grandes ilhas de estabilidade e, portanto, assim como no caso integrável, não são capazes de promover grandes flutuações na dinâmica do oscilador (Fig. 3.10).

Há um ponto importante que devemos salientar. O equilíbrio entre os sistemas central e externo é alcançado para valores de t/τ muito maiores do que no caso integrável. Na verdade, existem casos, onde mesmo para intervalos de tempo suficientemente grandes ($t/\tau \approx 10000$), podemos notar um nítido comportamento decrescente de E_O . Por esta razão, não é tão simples construir um gráfico análogo ao da Fig. 3.9, para o caso misto.

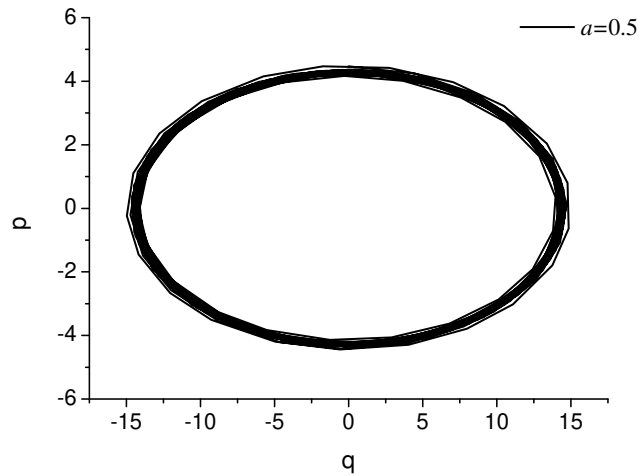


Figura 3.10: Trajetória do oscilador no seu espaço de fase. Neste caso, o banho contém 100 sistemas quárticos no regime integrável.

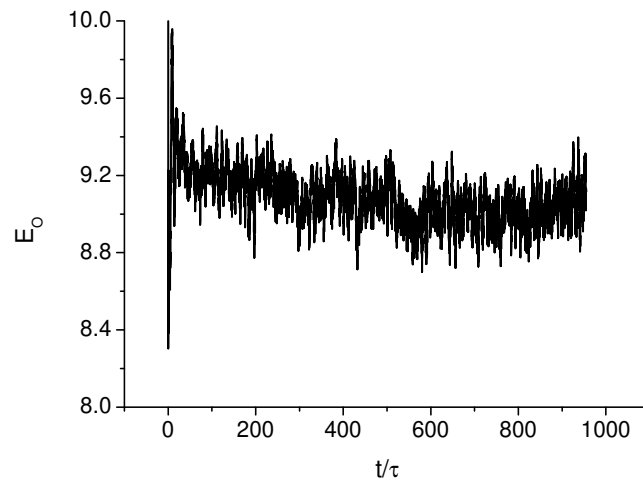


Figura 3.11: Energia do oscilador harmônico como função do tempo (em unidades de período τ do oscilador) para $N = 4000$ sistemas quárticos no banho no regime misto ($a = 0.5$).

Provavelmente, neste regime, a interação entre o oscilador e cada um dos quárticos, aliado à interação indireta entre os membros do banho, são capazes de provocar a destruição de algumas das ilhas de estabilidade presentes no espaço de fases de cada um dos sistemas quárticos. Desta maneira, à medida que o tempo passa, cada um dos elementos do banho enxerga o restante do sistema como uma perturbação capaz de alterar a topologia do seu espaço de fases, introduzindo mais caos ao sistema e, conseqüentemente, alterando a condição de equilíbrio. No entanto, quando comparamos as figuras 3.11 e 3.9, podemos verificar, por exemplo, que para $N = 4000$, as energias de equilíbrio para o regime misto são menores do que no regime integrável. Na verdade, os resultados numéricos nos permitem concluir

que a energia média do oscilador no equilíbrio (\bar{E}_o) obedece a desigualdade $\bar{E}_o^{(misto)} < \bar{E}_o^{(integrável)}$, para todo N . Provavelmente este deve ser um dos efeitos da inclusão do caos no banho.

3.4.3 Banho no regime caótico ($a = 0.01$)

Esta seção contém os principais resultados numéricos deste capítulo e tem, como finalidade, verificar o papel crucial que o caos desempenha no estabelecimento de um ambiente dissipativo. Diferentemente do que vimos nas seções 3.4.1 e 3.4.2, onde mesmo para ambientes extremamente grandes ($N \approx 10000$) não ocorre a dissipação total da energia do oscilador harmônico, quando o caos é o regime dominante no banho, podemos verificar uma grande sensibilidade do comportamento do oscilador com o número de graus de liberdade presente no sistema externo. Mostraremos que as grandes flutuações na energia, característica comum aos sistemas com baixa dimensionalidade, rapidamente dão lugar a processos dinâmicos muito robustos a medida que aumentamos o número de sistemas quárticos no ambiente. Gostaríamos de reforçar que todos os resultados desta seção são obtidos a partir de uma única realização numérica, ou seja, representam o comportamento do sistema durante uma única trajetória global.

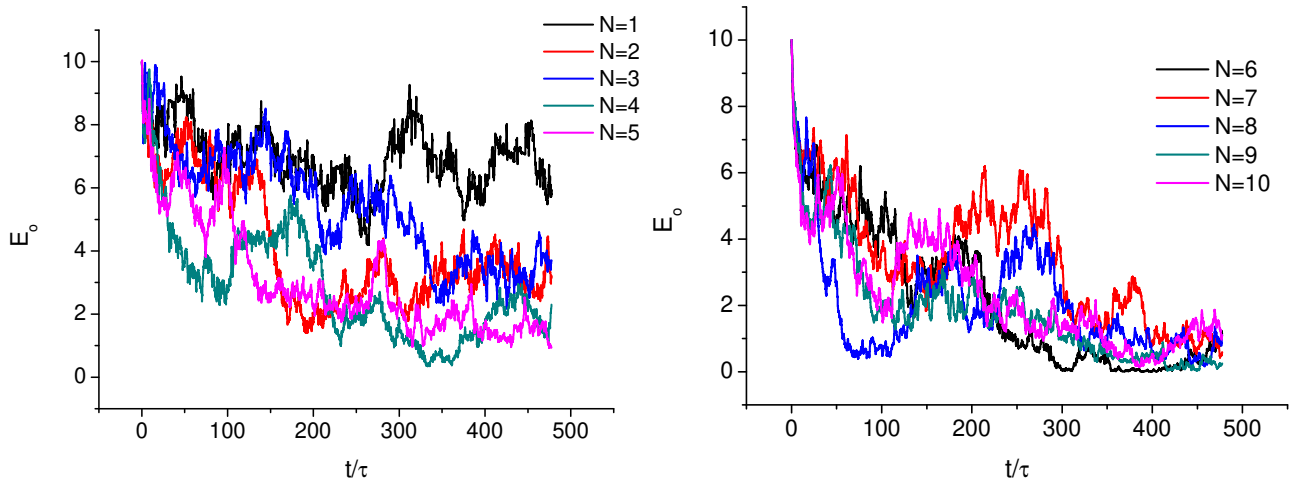


Figura 3.12: Energia do oscilador harmônico, como função do tempo para diferentes valores de N no regime caótico.

Começaremos analisando o comportamento efetivo do sistema de interesse sob a influência de um banho com poucos graus de liberdade. Por exemplo, para banhos extremamente “pequenos” ($1 \leq N \leq 10$), embora possamos notar um comportamento decrescente da energia do oscilador harmônico, as flutuações são tão grandes que a dissipação não pode ser caracterizada para cada realização numérica. Também não é possível, pelo menos através da análise das curvas de energia, identificar uma região de equilíbrio entre os dois subsistemas. As grandes flutuações persistem mesmo para intervalos de

integração muito maiores dos que os exibidos na Fig. 3.12.

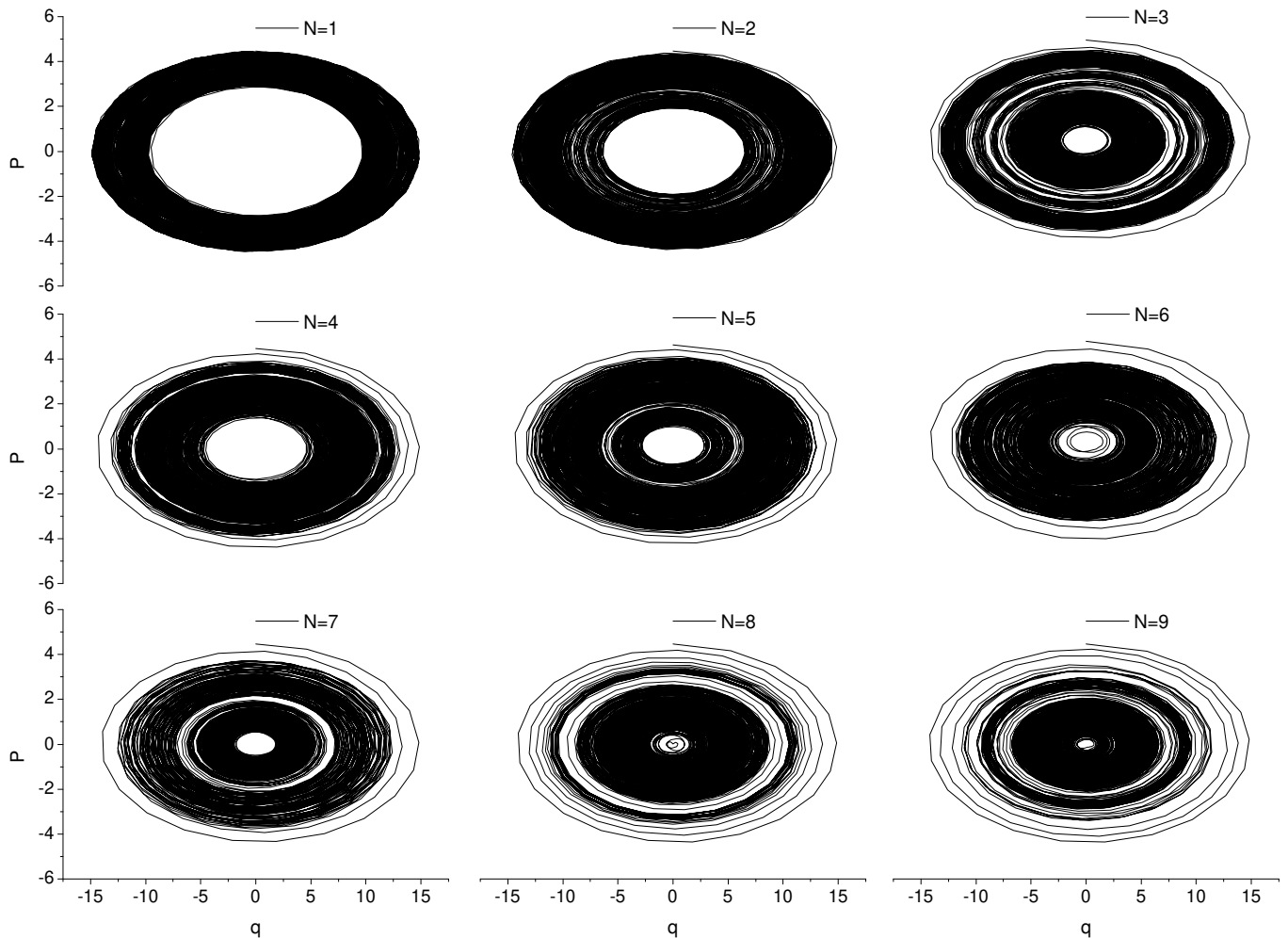


Figura 3.13: Trajetórias do oscilador no seu espaço de fase quando acoplado a ambientes externos com diferentes números de sistemas quárticos.

Quando comparamos a eficiência do banho caótico em dissipar a energia, em relação aos demais regimes dinâmicos, verificamos que a natureza caótica do acoplamento com o oscilador propicia um fluxo de energia muito maior, mesmo para N bastante pequeno. A Fig. 3.13 mostra que a dissipação é mais eficiente à medida que N cresce, mas a análise conjunta com a Fig. 3.12 deixa claro que as grandes flutuações na energia do oscilador não nos permitem estabelecer claramente uma condição de equilíbrio para cada trajetória do sistema. Fica evidente, portanto, que a baixa dimensionalidade do banho cria um ambiente onde as flutuações são significativamente grandes e não são capazes de conduzir o oscilador, de forma efetiva, ao equilíbrio. Nestes casos, o comportamento dissipativo e a condução ao equilíbrio, podem ser verificados quando mediamos os resultados a partir de inúmeras

realizações numéricas. Por exemplo, Bonança [6], mostra que há dissipação para $N = 1$ quando é feita uma média de ensemble com aproximadamente 40.000 trajetórias.

Estes resultados preliminares deixam claro que, no regime caótico, o aumento do número de graus de liberdade do ambiente externo altera significativamente a dinâmica do oscilador. Isto fica ainda mais evidente quando aumentamos o valor de N , ($10 \leq N \leq 100$). São visíveis a atenuação das flutuações da energia e a nítida tendência a uma dissipação exponencial. Na verdade, podemos mostrar que, à medida que N cresce, a curva de dissipação tende a um decaimento exponencial praticamente independente de N . Isso pode ser visto, por exemplo, se compararmos as curvas para $N = 1000$ e $N = 2000$, mostradas na Fig.3.15.

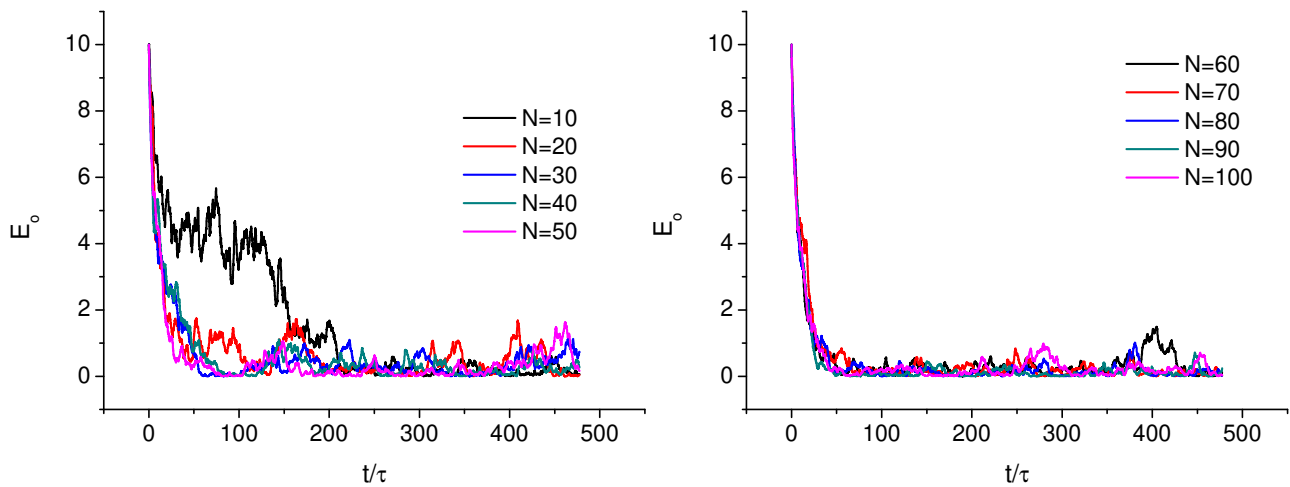


Figura 3.14: Energia do oscilador harmônico como função do tempo para diferentes valores de N no regime caótico.

Este resultado é uma consequência direta da reescala da constante de acoplamento com o “tamanho do sistema” e deixa claro, que para N suficientemente grande, o comportamento do oscilador é muito pouco alterado se acrescentarmos mais graus de liberdade ao banho, diferentemente do que ocorre para N pequeno. Em outras palavras, se o caos for o regime dinâmico predominante, basta que o acoplamento seja feito com um número finito de modos. Isto sugere que, mesmo nos casos onde o sistema que atua como banho possua um número muito grande de graus de liberdade, somente alguns são suficientes para atuarem como fontes dissipativas.

Por outro lado, se o número de graus de liberdade do ambiente externo for muito pequeno, as flutuações ficam extremamente grandes e isto não nos permite fazer qualquer previsão segura sobre o comportamento dinâmico efetivo do sistema de interesse. Nestes casos, como já ressaltamos, recorre-se ao comportamento médio, oriundo de inúmeras realizações numéricas, para evidenciar o comportamento dissipativo.

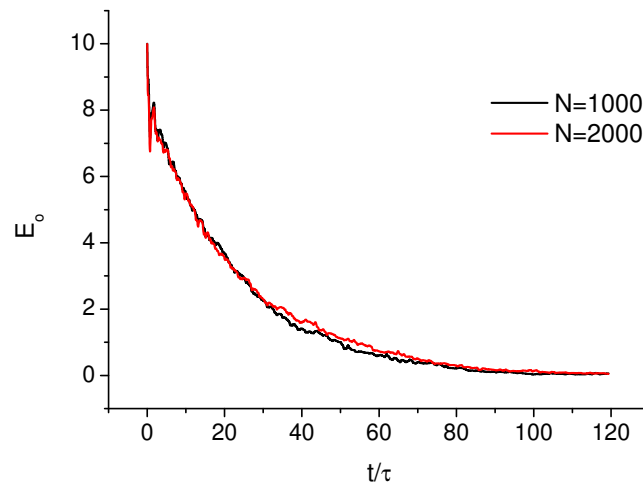


Figura 3.15: Energia do oscilador harmônico como função do tempo quando acoplado com banho com $N = 1000$ (preto) e $N = 2000$ (vermelho). As curvas são praticamente idênticas.

Uma análise preliminar da Fig.3.15 nos mostra que o banho atua como uma espécie de “meio viscoso” que dissipa a energia do oscilador harmônico em cada realização numérica. Portanto, podemos pensar que o banho cria um ambiente dissipativo com uma espécie de constante de arrasto independente do tamanho do sistema externo. Como veremos na seção 4.3, a teoria de resposta linear é capaz de mostrar que esta ideia é bastante razoável.

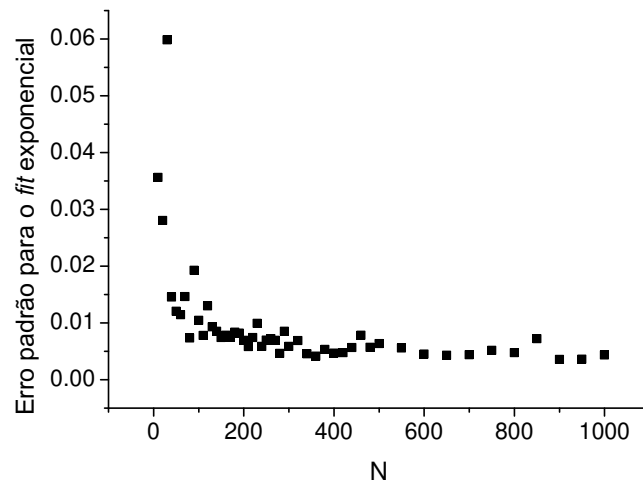


Figura 3.16: Erro padrão como função do número de sistemas presentes no banho.

Outro ponto importante é o fato de que à medida que N aumenta, o decaimento da energia fica mais próximo de uma curva exponencial. Isto fica evidente quando analisamos o valor do *erro padrão* do *fit* exponencial como função do número de sistemas quárticos no ambiente externo. A Fig.3.16 mostra

que, para $N \gtrsim 100$, as flutuações na curva de energia tendem a um mesmo valor, independentemente de N . A análise conjunta das Figuras 3.15 e 3.16 reforçam a ideia de que a eficiência com a qual um banho finito, num regime caótico, dissipa a energia de um sistema de interesse, não está ligada ao número de graus de liberdade presentes no banho³. Este resultado é muito animador, uma vez que, do ponto de vista computacional, é muito mais fácil lidarmos com um sistema dissipativo finito ($N \approx 100$) num regime caótico e não necessitarmos de qualquer média, do que com banhos caóticos de baixa dimensionalidade ou banhos integráveis no limite termodinâmico e precisarmos mediar os resultados através de inúmeras realizações numéricas. Em todos os sistemas estudados nesta tese, verificamos que o tempo computacional dispendido para a obtenção das curvas de dissipação nos processos efetivos são, sempre, muito menores do que aqueles obtidos a partir de médias. Para citar um exemplo, levamos cerca de 10 segundos para gerar uma curva de dissipação para $N = 100$ semelhante à exibida na figura 3.14, utilizando um computador com configurações bastante simples. Por si só, este fato seria o suficiente para destacar a importância dos resultados deste trabalho, no entanto, como veremos nas próximas seções, a utilização de banhos finitos, nos permite compreender um pouco melhor os mecanismos que conduzem dois sistemas interagentes ao equilíbrio.

3.4.4 Observação sobre o conjunto de parâmetros do problema

Todos os resultados mostrados nas seções anteriores foram obtidos para os mesmos valores de frequência e energia inicial do oscilador harmônico. Além disso, fixamos o valor da constante de acoplamento λ e escolhemos apenas três valores do parâmetro de caoticidade a . Por isso, deve ficar claro que é possível que obtenhamos resultados quantitativamente distintos para diferentes valores dos parâmetros acima citados, uma vez que eles possuem papel destacado na dinâmica global do sistema.

Obviamente, por conta das limitações naturais impostas à elaboração desta tese, fez-se necessário a escolha de um conjunto particular de parâmetros do sistema. No entanto, gostaríamos de enfatizar, que o comportamento qualitativo do sistema é basicamente o mesmo, qualquer que seja o conjunto de parâmetros escolhido. No início da seção 3.4.3, dissemos que os resultados obtidos a partir da dinâmica global do sistema são muito robustos, o que significa dizer que, conhecendo o comportamento do sistema para um conjunto especial de parâmetros, somos capazes de fazer previsões bastante seguras a respeito da dinâmica do problema quando definido com um outro conjunto qualquer.

Começaremos analisando a importância que o parâmetro de caoticidade (a) desempenha na eficiência do meio dissipativo. Os resultados das seções 3.4.1, 3.4.2 e 3.4.3 deixam evidente que o regime caótico é muito mais eficiente que os demais para promover dissipação. No entanto, baseados nestes resultados, não temos meios de caracterizar para que valores de (a) ocorre a transição entre os regimes

³Obviamente estamos nos referindo aos casos em que N é suficientemente grande.

dissipativos. A fig. 3.17 elucidada esta questão, mostrando a energia média do oscilador harmônico no equilíbrio como função do parâmetro de caoticidade (a) para um banho com $N = 100$.

É evidente a existência de três regimes dissipativos bastante definidos. Na primeira região, onde $0.3 \lesssim a \lesssim 1.0$, verificamos que muita pouca energia do oscilador é perdida para o banho. Nesta região estão contidas o regime integrável ($a = 1.0$) e o regime misto ($a = 0.5$) estudados nesta tese⁴. Em seguida, para $0.25 \lesssim a \lesssim 0.3$, é possível visualizar uma região de rápida transição na eficiência da dissipação. Para $0 \lesssim a \lesssim 0.25$ fica nítido que, a medida que diminuimos a , rapidamente o sistema entra num regime onde a eficiência da dissipação é praticamente constante.

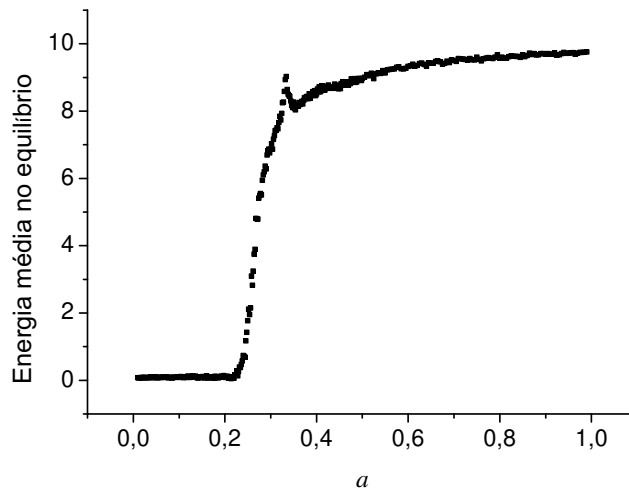


Figura 3.17: Energia média do oscilador harmônico no equilíbrio como função do parâmetro de caoticidade a ”

Outro parâmetro importante é a frequência ω_o , uma vez que o fluxo de energia entre o sistema central e o banho depende das escalas de tempo relativas entre o oscilador harmônico e o sistema quártico. Assim, aumentando o valor da frequência (ω_o) e mantendo fixa a energia dos elementos do banho, a velocidade relativa entre os dois subsistemas diminui, levando a uma dissipação menos eficiente (Fig. 3.18-a e 3.18-b).

Note que, se deixarmos osciladores com diferentes frequências interagindo, pelo mesmo tempo e independentemente, com um banho composto por $N = 100$ quárticos com mesma energia, podemos ver que, ao final do processo os osciladores com maiores frequências perdem menos energia (Fig. 3.18-a). Além disso, ao analisarmos as curvas de dissipação em unidades de período do oscilador (τ), Fig. 3.18-b, verificamos que além de perder menos energia ele realiza um número muito maior de oscilações.

⁴No gráfico podemos notar, nitidamente, que existe um pico localizado em $a = 1/3$. Este pico ocorre porque volta a ser integrável para $a = 1/3$ com a segunda integral de movimento do sistema dada por $I = 3p_x p_y + xy(x^2 + y^2)$. Para mais detalhes consultar a referência Joy and Sabir [41].

No entanto, mesmo que haja uma diferença quantitativa, o comportamento qualitativo do sistema permanece, uma vez que a dissipação efetiva continua ocorrendo.

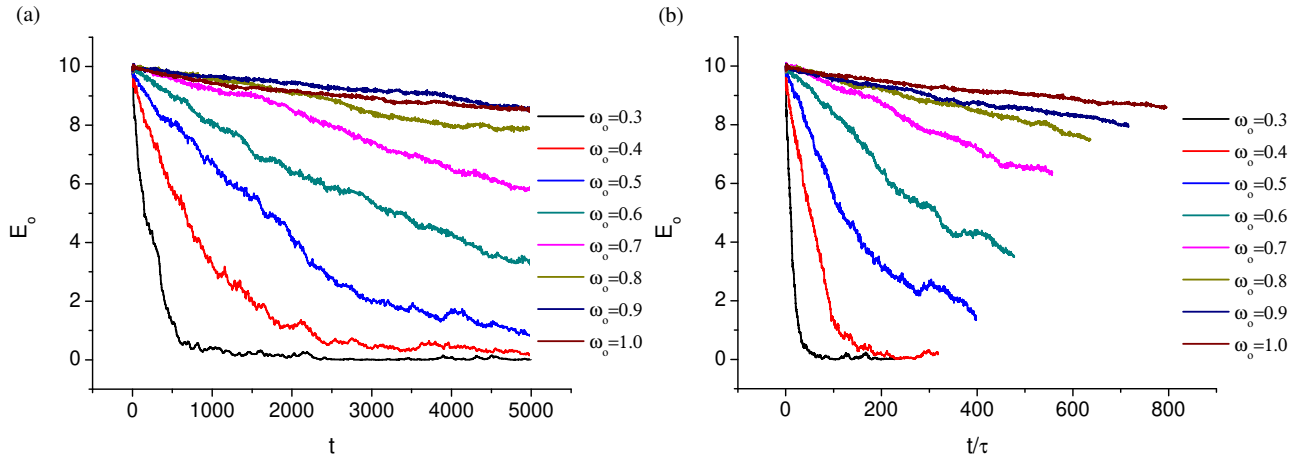


Figura 3.18: Curvas de dissipação como função do tempo (esquerda) e em unidades de período do oscilador (direita) para diferentes valores de frequência do oscilador. Quanto maior ω_0 menos eficiente é a dissipação. O banho contém $N = 100$ sistemas quárticos com energia individual $E_Q = 0.01$.

A constante de acoplamento (λ) também desempenha um papel muito importante na dinâmica global do sistema. Podemos verificar que a eficiência da dissipação, determinada, no regime caótico, pela taxa de decaimento⁵ (γ), também varia com λ , como pode ser visto na figura 3.19. Os valores de γ são obtidos a partir do *fit* exponencial ($E(t) = E_0 e^{-\gamma t}$) das curvas de dissipação para diferentes valores da constante de acoplamento. Dentro de um intervalo para o qual λ é suficientemente pequeno⁶, mostramos que a dependência pode ser bem descrita por uma função quadrática, o que também será demonstrado usando a teoria de resposta linear.

Os resultados numéricos desta seção deixam evidente o papel fundamental que o caos desempenha na capacidade de um ambiente externo dissipar a energia de um sistema de interesse. Mostramos que o sistema quártico tanto no regime integrável, como no misto, onde ainda existem muitas ilhas de movimento regular no seu espaço de fase, não são capazes de promover uma dissipação completa da energia do oscilador harmônico. A presença do caos altera drasticamente este panorama, transformando o sistema externo num sorvedouro natural e muito eficiente, mesmo para um número relativamente pequeno de graus de liberdade. Estes resultados preliminares, nos levam a crer que o ambiente externo pode se comportar como um reservatório térmico, absorvendo a energia do oscilador. Para comprovar essa hipótese, precisamos verificar a possibilidade de associação de uma temperatura ao sistema completo,

⁵Ou pelo tempo característico de dissipação ($t_d = 1/\gamma$)

⁶Quando nos afastamos do regime de acoplamentos fracos, as flutuações da energia começam a crescer e curvas suaves como as da figura 3.15, somente podem ser vistas se realizarmos uma média de várias realizações.

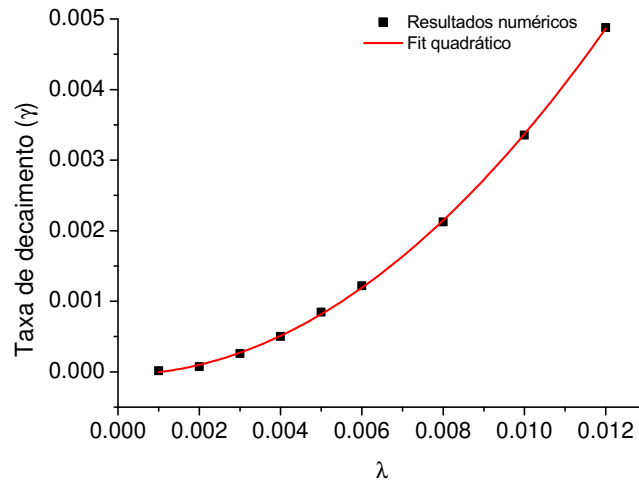


Figura 3.19: Taxa de decaimento (γ) como função da constante de acoplamento (λ) para $N = 100$ e $a = 0.01$. A curva é bem descrita por uma função quadrática.

ou seja, necessitamos olhar para as distribuições de energia de ambos os subsistemas após alcançado o equilíbrio. Este é o intuito da próxima seção.

3.4.5 Distribuição de energia do banho

Os resultados numéricos das seções anteriores mostram que, em todos os regimes (integrável, misto e caótico), é possível visualizarmos o estabelecimento do equilíbrio dinâmico do sistema completo para N suficientemente grande. Nestes casos, fixamos a condição de equilíbrio como aquela onde as energias de cada subsistema tornam-se aproximadamente constantes. Excetuando, o regime dinâmico misto, para o qual o equilíbrio é atingindo, em alguns casos, para tempos muito longos (ver seção 3.4.5.2), nos demais a condição de equilíbrio é alcançada para tempos razoavelmente curtos. Principalmente no regime caótico, a região de equilíbrio é bastante nítida e caracterizada por pequenas flutuações em torno da energia média final (ver por exemplo a fig.3.15).

Nesse casos, o banho caótico finito atua absorvendo a energia do oscilador e, de certa forma, simula o efeito de um reservatório infinito. Para valores baixos de N , a eficiência do fluxo de energia está intimamente associada ao número de graus de liberdade do banho e, portanto, a analogia com o reservatório infinito somente pode ser feita no limite em que N é suficientemente grande. Cabe, assim, a pergunta: podemos definir uma temperatura de equilíbrio entre os dois subsistemas? Uma resposta parcial foi dada por Bonança e Aguiar [6, 40] para o caso $N = 1$ e mostra que existe a possibilidade de definir T a partir da modificação da definição de entropia [33, 34]. Esta dificuldade está diretamente ligada ao baixo número de graus de liberdade do banho.

Mesmo quando $N = 100$, estamos muito longe do limite termodinâmico e, por esta razão, não podemos assegurar que o banho finito, de fato, comporta-se como um reservatório térmico. Para isto, precisamos determinar as distribuições de energia de ambos subsistemas após atingirem o equilíbrio. Podemos fazer isto de duas maneiras. A primeira consiste em contar, para um instante de tempo fixo, no equilíbrio, o número de sistemas quárticos com energia no intervalo $(E, E + dE)$ para um número muito grande de condições iniciais (média de *ensemble*). A outra possibilidade é contar, para uma única realização e partir de um instante de tempo fixado após o equilíbrio, o número de sistemas no intervalo $(E, E + dE)$ e repetir o processo inúmeras vezes a um passo de tempo pré-determinado (média no tempo). As distribuições estatísticas de ambas as médias serão as mesmas se o sistema for ergódico.

Nas seções 3.4.5.1, 3.4.5.2 e 3.4.5.3, a seguir, mostraremos alguns resultados sobre as distribuições estatísticas provenientes das médias de *ensemble* e no tempo para diferentes regimes dinâmicos e números de graus de liberdade. Apesar de, nesta tese, não estarmos interessados numa análise mais aprofundada sobre as propriedades do sistema nos regimes integráveis e misto, optamos por mostrar os seus respectivos resultados para destacar o importante papel desempenhado por N em problemas do tipo “sistema de interesse + banho”.

3.4.5.1 Regime integrável

Os resultados numéricos para o regime integrável mostram a equivalência entre as distribuições no tempo e no *ensemble*, mesmo para banhos muito pequenos ($N = 10$). Como pudemos ver na fig. 3.9, a inclusão de mais graus de liberdade altera muito pouco a dinâmica global do sistema, indicando que a topologia do espaço de fases de cada quártico é muito pouco alterada, garantindo, assim, basicamente os mesmos estados acessíveis a cada um deles. Neste caso, a ergodicidade manifesta-se, mesmo para N pequeno, por que a dinâmica de cada quártico está restrita a um pequeno subespaço (cada toro) de sua superfície de energia.

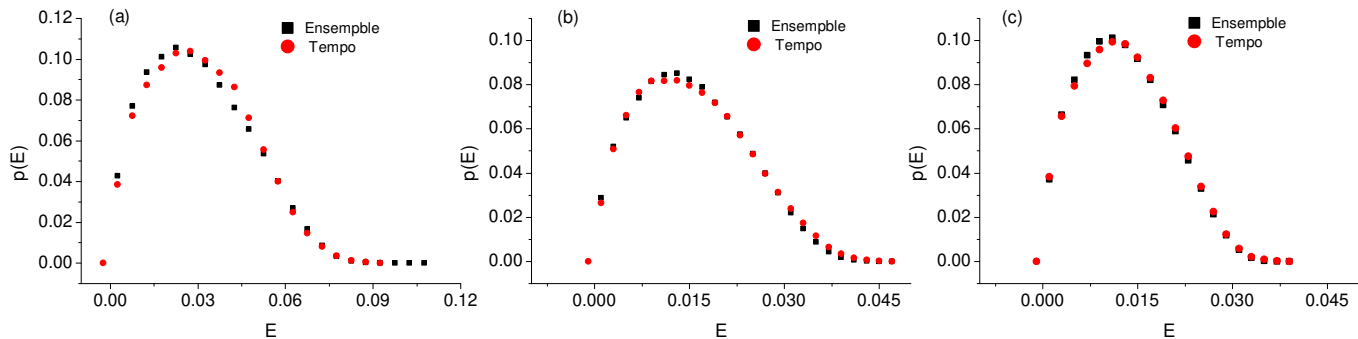


Figura 3.20: Distribuições de energia no tempo (quadrados pretos) e no *ensemble* (círculos vermelhos) para o banho no regime integrável com diferentes valores de N : (a) $N = 10$; (b) $N = 50$; (c) $N = 100$.

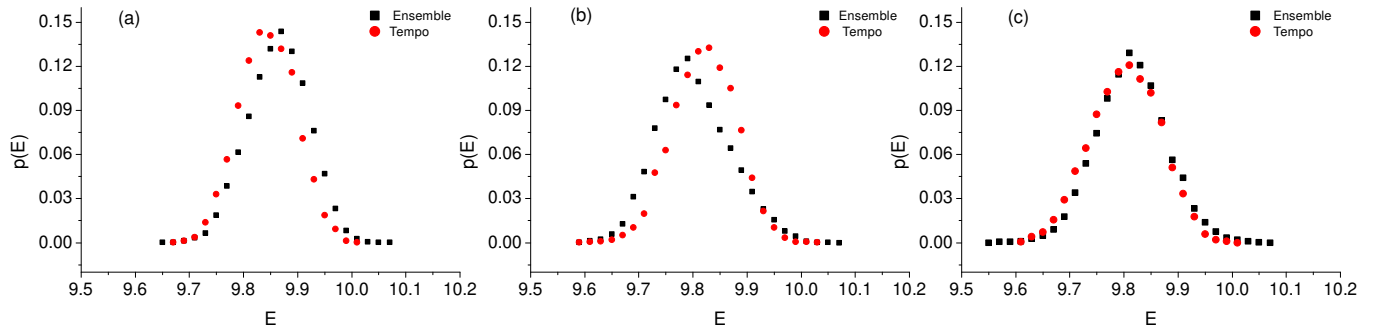


Figura 3.21: Distribuições de energia no tempo (quadrados pretos) e no *ensemble* (círculos vermelhos) para o oscilador harmônico acoplado ao banho no regime integrável com diferentes valores de N : (a) $N = 10$; (b) $N = 50$; (c) $N = 100$.

A escolha aleatória das condições iniciais distribui, entre as poucas órbitas estáveis (fig. 3.3-a), a dinâmica de cada quártico, o que torna equivalente as médias no tempo e no *ensemble*. Por outro lado, quando olhamos para o oscilador, percebemos uma maior sensibilidade com respeito à variação do número de graus de liberdade do banho. Neste caso, como o oscilador possui apenas um grau de liberdade, é razoável pensar que o tamanho do banho exerça uma influência significativa em sua dinâmica.

3.4.5.2 Regime misto

O espaço de fases do sistema quártico no regime misto exibe, como vimos na fig. 3.3-b, ilhas de instabilidade rodeadas por um “mar de caos”. Portanto, a interação de primeira ordem entre os elementos do banho e o sistema central e as de segunda ordem (interação indireta via o oscilador) entre os quárticos, devem ser capazes de destruir muitas destas ilhas, aumentando significativamente o volume do espaço de fases dos membros do banho.

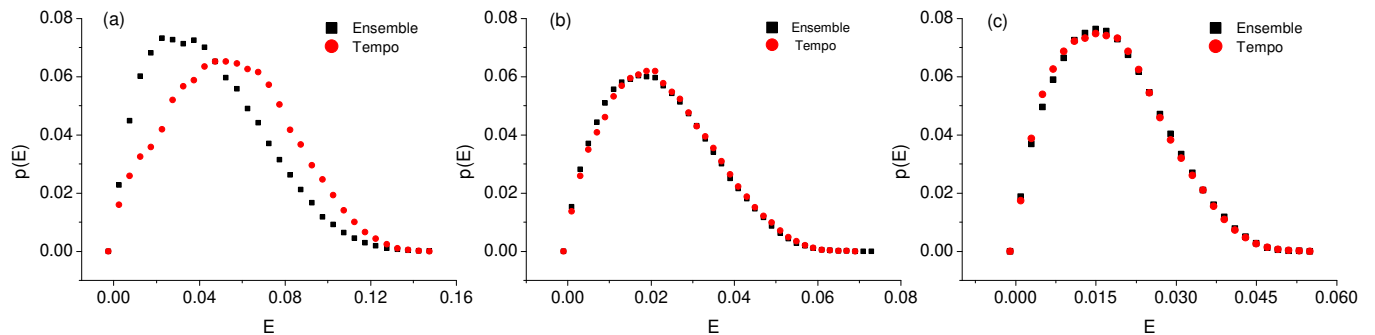


Figura 3.22: Distribuições de energia no tempo (quadrados pretos) e no *ensemble* (círculos vermelhos) para o banho no regime misto com diferentes valores de N : (a) $N = 10$; (b) $N = 50$; (c) $N = 100$.

Certamente, esta característica deve contribuir enormemente para a diferença entre as distribuição no tempo e no *ensemble* para N pequenos (fig. 3.22).

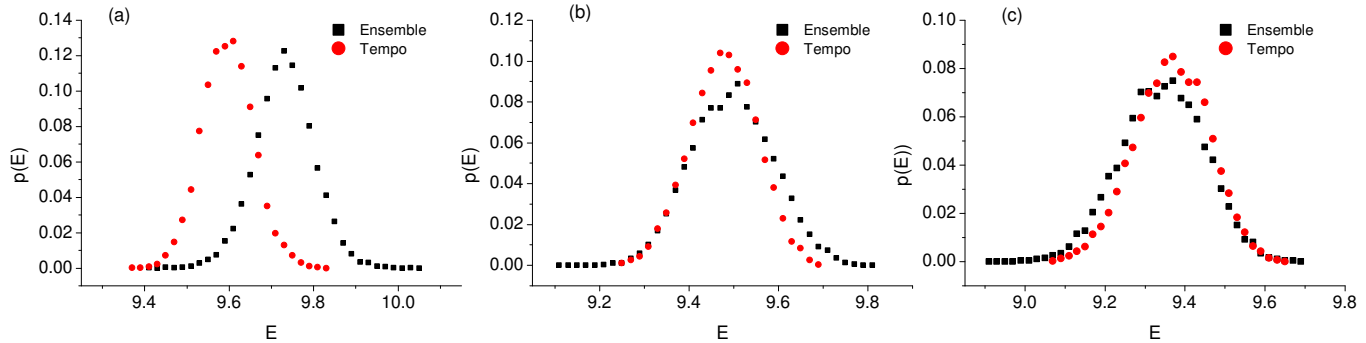


Figura 3.23: Distribuições de energia no tempo (quadrados pretos) e no *ensemble* (círculos vermelhos) para o oscilador harmônico acoplado ao banho no regime misto com diferentes valores de N : (a) $N = 10$; (b) $N = 50$; (c) $N = 100$.

A medida que N cresce, o grande número de interações (mesmo que indiretas) deve ser capaz de estabelecer uma estrutura topológica do espaço de fases suficientemente estáveis para resistir às flutuações temporais. Novamente podemos notar que as distribuições de energia do oscilador harmônico não concordam quando este está acoplado à banhos muito pequenos (fig. 3.23). No entanto, é fácil perceber que, aumentando N , elas tendem ao mesmo resultado.

3.4.5.3 Regime caótico

Como dissemos anteriormente, o foco desta tese está voltada para o estudo da influência do caos e do número de graus de liberdade presentes no sistema externo acoplado ao sistema central.

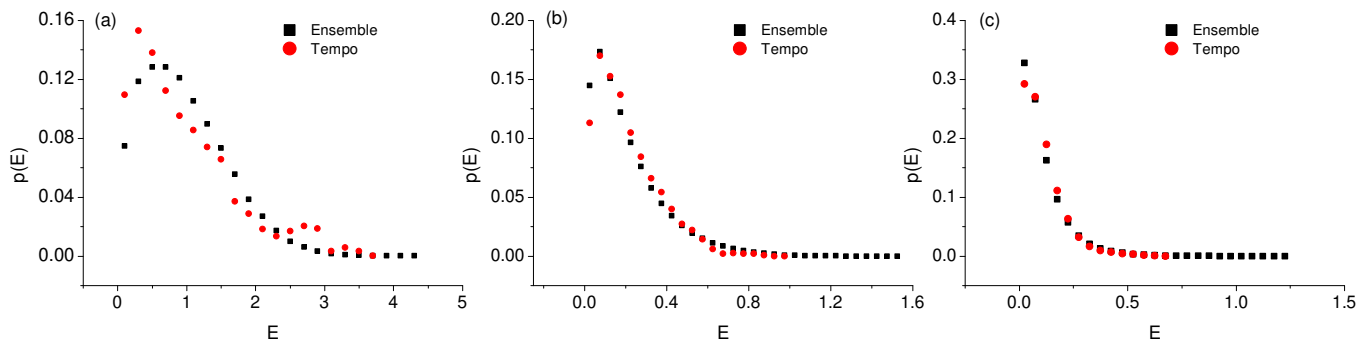


Figura 3.24: Distribuições de energia no tempo (quadrados pretos) e no *ensemble* (círculos vermelhos) para o banho no regime caótico com diferentes valores de N : (a) $N = 10$; (b) $N = 50$; (c) $N = 100$.

Precisamos verificar sob quais condições encontramos ergodicidade no sistema, visto que necessitamos de unicidade de resultados, independentemente do tipo de média que fazamos. Os resultados mostrados, nas fig. 3.24 e 3.25 corroboram o que já vimos nas seções 3.4.5.1 e 3.4.5.2 (principalmente os resultados para o OH), ou seja, comprovam que a natureza ergódica do sistema completo, está intimamente ligado ao tamanho do subsistema que atua como banho.

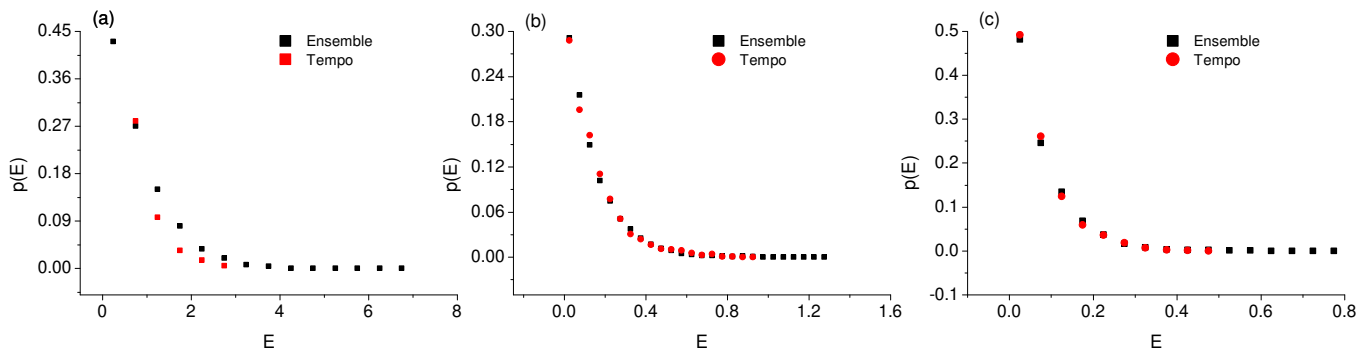


Figura 3.25: Distribuições de energia no tempo (quadrados pretos) e no *ensemble* (círculos vermelhos) para o oscilador harmônico acoplado ao banho no regime caótico com diferentes valores de N : (a) $N = 10$; (b) $N = 50$; (c) $N = 100$.

Trabalharemos, portanto, com um par de parâmetros (a, N) que garantam a ergodicidade do sistema. Desta maneira estamos livres para escolher o tipo de média (no tempo ou no *ensemble*) mais conveniente para o tipo de problema a ser estudado. Pode parecer, à primeira vista, que a média no tempo seja, em qualquer circunstância, a mais apropriada. Mas isto não é verdade. Médias no tempo confiáveis, exigem intervalos de tempo entre eventos suficientemente grandes para que um ponto num dado intervalo seja, praticamente, independente do ponto do intervalo vizinho. Isto significa que, em alguns casos, necessitamos de intervalos de tempo computacional muito grandes, o que acarreta, invariavelmente, um acúmulo do erro inerente à solução numérica. Por essa razão, mesmo sendo mais dispendiosas em termos de tempo computacional, calcularemos as distribuições de equilíbrio, tanto do oscilador quanto do sistema quártico, a partir da média de *ensemble*. Estes resultados, aliados ao Teorema de Equipartição da Energia (TEE), nos auxiliarão na tarefa de mostrar que o banho caótico finito pode atuar como um reservatório térmico.

3.5 O Teorema de Equipartição da Energia

Faremos uma pequena pausa nos resultados numéricos com o intuito de rever o célebre Teorema de Equipartição da Energia [42]. Poderíamos seguir o curso normal das seções anteriores, apresentando os

resultados detalhados sobre as distribuições de equilíbrio do sistemas central e externo e, em seguida, utilizar o TEE para verificar os resultados numéricos. No entanto, como dizem os mais sábios, mudanças de ares são sempre proveitosas e assim garantimos o suspense sobre a concordância entre o tão importante resultado da mecânica estatística e os nossos resultados numéricos.

Começaremos com a formulação mais geral do teorema que diz:

A energia média de um sistema físico descrito pelo conjunto de graus de liberdade (x_n) e com Hamiltoniana H , obedece a seguinte lei de equipartição no equilíbrio térmico

$$\left\langle x_m \frac{\partial H}{\partial x_n} \right\rangle = \delta_{mn} k_B T, \quad (3.14)$$

onde δ_{mn} é a Delta de Kronecker. Este resultado vale para médias no ensemble, tanto para o micro-canônico como para o canônico, e para médias no tempo sob a hipótese de ergodicidade.

Em outras palavras, podemos dizer que termos com menores potências na Hamiltoniana contribuem com uma parcela maior para a energia média do sistema no equilíbrio. Obviamente, ainda não demos garantias de que o sistema de interesse está em equilíbrio térmico, mas caso isso seja verdadeiro, esperamos encontrar uma concordância entre os resultados numéricos e os obtidos a partir do TEE.

Aplicando o Teorema de Equipartição para a Hamiltoniano 3.7 encontramos:

Para o oscilador:

$$\left\langle \frac{P^2}{2m} \right\rangle = \frac{k_B T}{2} \quad (3.15)$$

$$\left\langle \frac{m\omega_o^2 q^2}{2} + \frac{\lambda_N q}{2} \sum_{n=1}^N x_n \right\rangle = \frac{k_B T}{2}; \quad (3.16)$$

e para o Potencial Quártico:

$$\left\langle \frac{P_{(x,y)n}^2}{2} \right\rangle = \frac{k_B T}{2} \quad (3.17)$$

$$\left\langle \frac{x_n^4 + x_n^2 y_n^2 + \lambda_N q x_n}{4} \right\rangle = \frac{k_B T}{4} \quad (3.18)$$

$$\left\langle \frac{y_n^4 + x_n^2 y_n^2}{4} \right\rangle = \frac{k_B T}{4} \quad (3.19)$$

Como os Hamiltonianos do oscilador harmônico e do sistema quártico são pares, a energia média dos

termos de acoplamento $\left\langle \sum_{n=1}^N qx_n \right\rangle$ das equações (3.16) e (3.18) são nulos. Logo, podemos concluir que no equilíbrio, $\bar{E}_{QS} = \frac{3}{2}\bar{E}_{OH}$ e que a energia total E_T é dada por

$$E_T = \left\langle \frac{P^2}{2m} \right\rangle + \left\langle \frac{m\omega_o^2 q^2}{2} \right\rangle + \sum_{n=1}^N \left[\left\langle \frac{P_{xn}^2 + P_{yn}^2}{2} \right\rangle + \left\langle \frac{x_n^4 + y_n^4}{4} + \frac{x_n^2 y_n^2}{2} \right\rangle \right].$$

Substituindo as contribuições dadas pelas equações (3.16) a (3.19) obtemos

$$E_T = \left(1 + \frac{3N}{2}\right) K_B T. \quad (3.20)$$

Por outro lado, como o sistema é conservativo, podemos escrever a energia total no equilíbrio em termos dos valores individuais⁷ em $t = 0$, ou seja, $E_T = E_o + NE_{QS}$. Isto significa que a temperatura final de equilíbrio entre o oscilador e o banho cai com o inverso do número de graus de liberdade do sistema externo, de acordo com a expressão

$$\begin{aligned} k_B T &= \frac{2E_T}{2 + 3N} = \frac{2(E_o + NE_{QS})}{2 + 3N} \\ &= \frac{2N}{2 + 3N} E_{QS} + \frac{2}{2 + 3N} E_o \end{aligned} \quad (3.21)$$

Aplicando, em particular, o resultado acima para o caso em que o oscilador harmônico tem energia inicial $E_o = 10.0$ e o banho tem $N = 100$ e $E_{QS}^{(n)} = 0.01$ para todo N , encontramos que a energia média do oscilador no equilíbrio deve ser dada por

$$\bar{E}_{OH} = \frac{200}{302} E_{QS} + \frac{2}{302} E_o \approx 0.073. \quad (3.22)$$

e

$$\bar{E}_{QS} = \frac{3}{2} \bar{E}_{OH} \approx 0.1095 \quad (3.23)$$

Portanto, se o oscilador e o banho, de fato, estiverem em equilíbrio térmico, devemos esperar que os valores médios das energias de cada um dos subsistemas, no equilíbrio, satisfaçam as relações (3.22) e (3.23). Antes de retornarmos aos resultados numéricos, é preciso salientar que as figuras 3.9 e 3.11 indicam claramente que o teorema de equipartição da energia não pode ser aplicado para os casos em que o banho possui um regime dinâmico diferente do caótico.

⁷Devido à condição inicial $q(0) = 0$.

3.6 O banho finito como um reservatório térmico

Na seção 3.4.5.3, vimos que as descrições estatísticas a partir de médias no *ensemble* e no tempo são equivalentes. Com isso, concluímos que, para N suficientemente grande, o sistema é ergódico e isto significa dizer que todos os estados acessíveis ao sistema são igualmente prováveis no equilíbrio. A comparação entre os resultados, para o oscilador harmônico, das seções 3.4.5.1, 3.4.5.2 e 3.4.5.3 mostra, ainda, que a presença do regime completamente caótico no banho permite que a hipótese de ergodicidade seja aplicada a sistemas cujo número de graus de liberdade é menor do que nos outros regimes. Aliado a isso, o banho caótico finito é capaz de criar um ambiente dissipativo muito eficiente, absorvendo a energia do oscilador a uma taxa exponencial e conduzindo-o ao equilíbrio dinâmico para cada trajetória global do sistema.

Para respondermos se é possível definirmos uma temperatura de equilíbrio, precisamos revisitar as distribuições de energia de cada subsistema. Analisaremos, com detalhes, as distribuições para o caso em que $\omega_o = 0.3$, $E_o = 10.0$, $a = 0.01$, $N = 100$ e $E_{QS} = 0.01$.

Começemos, portanto, analisando a distribuição de energia do banho. Note, na figura 3.26, que os resultados numéricos podem ser muito bem descritos por uma função do tipo $p_{QS}(E) = 1/\bar{E}_{QS} \exp(-E/\bar{E}_{QS})$, onde $\bar{E}_{QS} \approx 0.1094 \pm 0.006$ é a energia média de cada elemento do banho no equilíbrio.

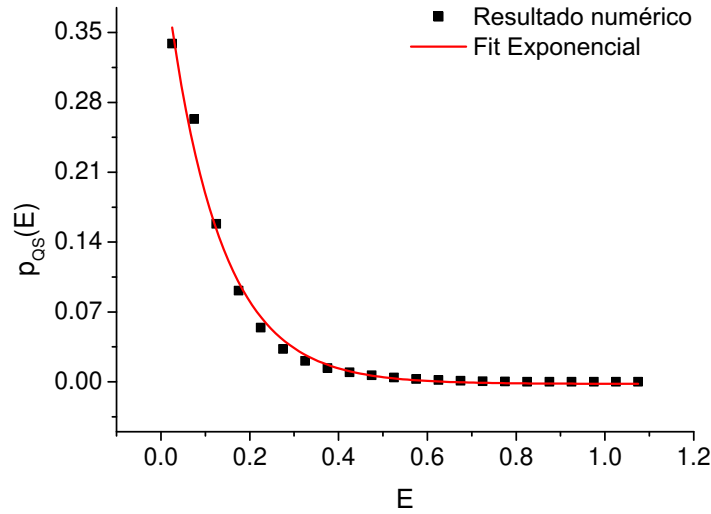


Figura 3.26: Distribuição de energia do banho no equilíbrio com os parâmetros $\omega_o = 0.3$, $E_o = 10.0$, $a = 0.01$, $N = 100$ e $E_{QS} = 0.01$.

Se compararmos este resultado com a previsão do teorema de equipartição (eq. equação (3.23)) verificamos uma boa concordância entre ambos. Mas isto não é o suficiente para garantirmos que o banho atua como um reservatório térmico. Para isso, precisamos mostrar que a distribuição de energia

do oscilador é do tipo Boltzmann, dada por $p_o(E) = 1/\bar{E}_o \exp(-E/\bar{E}_o)$. A análise da figura 3.27 mostra que é, justamente, isto o que acontece. Neste caso, a energia média do oscilador é obtida a partir do *fit* dos resultados numéricos e vale $\bar{E}_o \approx 0.0723 \pm 0.002$.

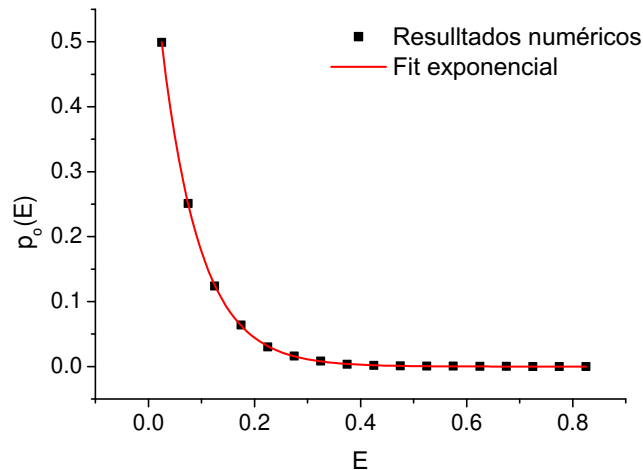


Figura 3.27: Distribuição de energia do oscilador no equilíbrio. Os parâmetros do sistema são $\omega_o = 0.3$, $E_o = 10.0$, $a = 0.01$, $N = 100$ e $E_{QS} = 0.01$.

Comparando os valores encontrados numericamente para o oscilador e para o banho verificamos que

$$\bar{E}_o \approx \frac{2}{3} \bar{E}_{QS},$$

confirmando a previsão do teorema da equipartição da energia.

Este é um importante resultado deste trabalho, pois mostra que, além do fato de a dissipação ocorrer para uma única realização numérica, podemos associar uma temperatura à condição de equilíbrio. Isto sugere que, mesmo que o banho possua um número muito grande de graus de liberdade, há a possibilidade de que apenas um número razoavelmente pequeno deles sejam suficientes para se estabelecer um ambiente dissipativo muito eficiente. Outro ponto importante é o tempo computacional extremamente baixo para a obtenção de todos os resultados efetivos.

3.7 Considerações finais

Os resultados deste capítulo evidenciam a importância do caos nos processos de relaxação de sistemas físicos e permitem-nos enxergar novas possibilidades de tratamento numérico de sistemas finitos. O comportamento robusto dos processos dissipativos efetivos, aliado à confirmação de que este fenômeno não é exclusivo do sistema tratado aqui (ver Apêndice C) reforçam a intuição sobre a maneira

como a dissipação se manifesta em sistemas físicos reais.

No próximo capítulo, utilizando a Teoria de Resposta Linear, mostraremos que é possível reproduzir os resultados numéricos referentes à evolução temporal do oscilador harmônico. Como veremos, o banho interage com o oscilador simulando a ação de uma força flutuante e o caos é responsável pela perda de memória da dinâmica microscópica do reservatório e, conseqüentemente, pelo surgimento de uma força de atrito, sobre o oscilador, proporcional à sua velocidade. É importante destacar que todos estes resultados serão amparados por uma análise da evolução temporal das distribuições iniciais, permitindo a aplicação da Teoria de Resposta Linear para a descrição da dinâmica a tempos longos.

Capítulo 4

O tratamento analítico

*“O Binômio de Newton é tão belo como a Vênus de Milo.
O que há é pouca gente a dar por isso.”*

Fernando Pessoa (Álvaro de Campos)

Os resultados numéricos do capítulo anterior mostraram que um sistema finito pode se comportar como um reservatório térmico desde que possua dinâmica microscópica caótica. Diferentemente do que ocorre em outros modelos de sistemas dissipativos, não necessitamos realizar médias para visualizar o fluxo de energia entre o sistema de interesse e o banho. Restringimo-nos ao estudo da dinâmica do sistema no regime de acoplamentos fracos, o que evita as grandes flutuações no tempo e, ainda, nos permite aplicar a teoria de resposta linear (TRL) na tentativa de compreender os mecanismos físicos que tornam o banho caótico finito um excelente ambiente dissipativo.

Este capítulo, portanto, tem como objetivo encontrar a função resposta do banho em termos de suas funções de autocorrelação dinâmicas. Isto nos permitirá justificar a reescala da constante de acoplamento λ_N de acordo com o tamanho do ambiente externo. Além disso, para que possamos utilizar a TRL na descrição do comportamento dinâmico do sistema a tempos longos, faremos uma análise da dinâmica das distribuições de energia, de forma a garantir todas as hipóteses pertinentes à TRL. Por fim, encontraremos o efeito médio do acoplamento do banho na dinâmica do oscilador e mostraremos que o conjunto finito de sistemas quárticos simula a ação de um meio viscoso, cuja constante de arrasto depende da energia média do banho, ou seja, da temperatura do sistema.

Gostaríamos de fazer somente uma observação antes de darmos início aos cálculos deste capítulo. Utilizaremos o termo “equilíbrio não interagente” para designar a condição do sistema em $t = 0$, antes de “ligarmos” a perturbação. Em outras palavras, o termo “equilíbrio não interagente” refere-se ao

estado inicial em que cada membro do sistema tem sua trajetória restrita à sua própria superfície de energia. Isto é necessário para evitar possíveis confusões com o “equilíbrio” obtido após a termalização do sistema, termo amplamente utilizado no capítulo anterior.

4.1 A Teoria de Resposta Linear aplicada ao banho

Começaremos esta seção revisitando a Hamiltoniana completa do sistema, dada por

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2 q^2}{2} + \sum_{n=1}^N \left[\frac{p_{x_n}^2 + p_{y_n}^2}{2} + \frac{a}{4} (x_n^4 + y_n^4) + \frac{x_n^2 y_n^2}{2} + \lambda q x_n \right] \quad (4.1)$$

Note que usamos λ , ao invés de λ_N com o intuito de demonstrar a necessidade da reescala. Como estamos interessados no efeito do acoplamento do banho sobre a dinâmica do oscilador, olharemos para a equação de Hamilton que descreve a força sobre o oscilador

$$\dot{p} = -m\omega_0^2 q - \lambda \sum_{n=1}^N x_n$$

o que resulta em

$$\ddot{q}(t) + \omega_0^2 q(t) = -\frac{\lambda}{m} \sum_{n=1}^N x_n(t) = -\frac{\lambda}{m} X(t). \quad (4.2)$$

O lado direito da equação (4.2), acima, pode ser visto como uma variável macroscópica do sistema, atuando como uma força externa dependente do tempo $F(t) = \frac{\lambda}{m} X(t)$. Sua forma depende do regime dinâmico presente no banho. No caso do banho finito num regime altamente caótico, como distribuimos aleatoriamente as condições iniciais entre os membros do ambiente externo e como estamos num regime de acoplamento fraco, podemos substituir a força $F(t)$ pela evolução temporal do seu valor médio $\langle F(t) \rangle$, o que resulta em

$$\ddot{q} + \omega_0^2 q = -\frac{\lambda}{m} \langle X(t) \rangle. \quad (4.3)$$

Como vimos na seção 2.5, podemos escrever o comportamento médio de qualquer força externa dependente do tempo, que atua num banho térmico, em termos da resposta do próprio banho a estes estímulos. No entanto, é necessário destacarmos que a Teoria de Resposta Linear é válida quando a interação é suficientemente fraca e enquanto a distribuição de energia do banho estiver suficientemente próxima à distribuição inicial. Geralmente, esta última condição é satisfeita para intervalos de tempo convenientemente pequenos, mas a intenção aqui é estender a aplicação da TRL para a descrição da dinâmica a tempos longos. Em breve, mostraremos que isso é possível.

A representação pictórica do sistema, dada pela figura 4.1, nos ajuda a ver que existe uma hierarquia de fontes perturbativas sobre cada elemento do banho. A fonte primária é dada pela dinâmica do oscilador harmônico e a secundária, pelo conjunto de perturbações oriundos da dinâmica dos demais sistemas do banho e transmitida, indiretamente, pelo oscilador.

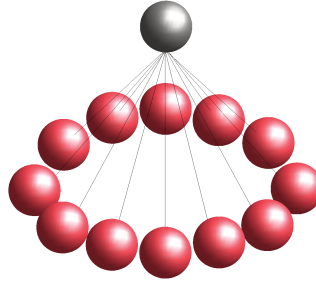


Figura 4.1: Esquema que representa a interação entre os elementos do banho (esferas vermelhas) e o sistema central (esfera cinza).

Portanto, lidaremos com a TRL como uma teoria de perturbação aplicada ao banho, onde a fonte perturbativa é o oscilador harmônico. Logo, assim que o acoplamento é ligado, o banho sente a dinâmica do oscilador e é excitado, saindo do equilíbrio inicial. Daí, ao invés de olharmos para a resposta completa do ambiente, tomamos somente o termo linear desta resposta e, com ele, realimentamos o oscilador, como ilustrado na figura 4.2.

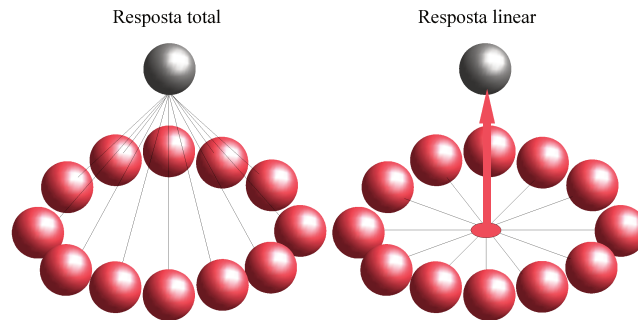


Figura 4.2: O oscilador é visto como uma fonte perturbadora externa que excita o banho, retirando-o do equilíbrio a partir de $t = 0$. O banho, por sua vez, responde, realimentando o oscilador somente com a parte linear da resposta completa.

A TRL nos diz, de acordo com a equação (2.41), que podemos escrever a evolução temporal do valor médio da força externa $F(t) = \sum_n x_n(t)$ como

$$\langle \sum_n x_n(t) \rangle = \langle \sum_n x_n(t) \rangle_0 - \lambda \int_0^t \phi_{XX}(t-s)q(s)ds, \quad (4.4)$$

onde o índice “0” indica a média tomada no *equilíbrio não interagente* ($t = 0$). Mais uma vez, gostaríamos de deixar bastante claro o que estamos denominando *equilíbrio não interagente*. A teoria de Resposta Linear é bastante utilizada nos laboratórios como ferramenta para se descrever a resposta de um determinado sistema, suficientemente grande, para que possa ser visto como um banho térmico. Portanto, neste caso, *equilíbrio* significa, simplesmente, ***equilíbrio térmico***. No nosso problema consideraremos uma definição um pouco mais geral. Diremos que o equilíbrio denotado pelo índice “0” existe quando os membros do banho não interagem entre si, obedecendo as distribuições *pseudo-microcanônica* ou *pseudo-canônica* (eq. (4.8)).

Voltando à equação (4.4), devemos destacar que, para qualquer distribuição de equilíbrio, como o Potencial Quártico é par ¹ sempre teremos $\langle \sum_n x_n(t) \rangle_0 = \sum_n \langle x_n(t) \rangle_0 = 0$. Logo a equação (4.4) pode ser reescrita como

$$\langle X(t) \rangle = \langle \sum_n x_n(t) \rangle = -\lambda \int_0^t \phi_{XX}(t-s)q(s)ds, \quad (4.5)$$

onde $\phi_{XX}(t-s)$ é a função resposta da variável $X(t)$ quando acoplada com o oscilador por meio da própria $X(t)$, dada pela equação (2.40). Portanto, estudaremos o efeito da resposta linear do banho sobre a dinâmica do oscilador a partir do estudo da equação

$$\ddot{q} + \omega_0^2 q = \frac{\lambda^2}{m} \int_0^t \phi_{XX}(t-s)q(s)ds. \quad (4.6)$$

Em linhas gerais, a teoria de resposta linear é uma teoria de perturbação aplicada a distribuições. Portanto, a equação (4.5) expressa o comportamento médio da dinâmica do banho a partir da resposta em primeira ordem do reservatório quando este é perturbado pelo sistema de interesse. Na próxima seção nos ocuparemos do cálculo de $\phi_{XX}(t-s)$.

4.2 Função Resposta para N sistemas quárticos não interagentes

O cálculo de ϕ_{XX} , a função resposta do banho finito, é, na verdade, uma generalização dos resultados obtidos por Bonança e Aguiar [6, 40], para o caso em que o banho é composto por um único sistema quártico. Optamos por descrever, praticamente, todas as etapas dos cálculos, deixando para o leitor a escolha entre o “passo a passo” ou, somente, os resultados finais.

¹ $H_Q(x, y, p_x, P_y) = H_Q(-x, -y, -p_x, -p_y)$.

Como vimos na seção 2.5, da equação (2.39) e da equação (2.40), temos que

$$\begin{aligned}\phi_{XX}(t) &= \int X(t) \{\rho_e, X(0)\} \prod_{i=1}^N dx_i dy_i dp_{x_i} dp_{y_i} \\ &= \int \sum_m x_m(t) \left\{ \rho_e, \sum_n x_n(0) \right\} \prod_{i=1}^N dx_i dy_i dp_{x_i} dp_{y_i} \\ &= - \int \sum_m x_m(t) \sum_n \frac{\partial \rho_e}{\partial p_{x_n}} \prod_{i=1}^N dx_i dy_i dp_{x_i} dp_{y_i}.\end{aligned}$$

Tomando $H_Q = \sum_{i=1}^N H_Q^{(i)}$ temos que $\frac{\partial H_Q}{\partial p_{x_n}} = \frac{\partial H_Q^{(n)}}{\partial p_{x_n}} = p_{x_n}$, ou seja, $\partial p_{x_n} = \frac{1}{p_{x_n}} \partial H_Q^{(n)}$, daí

$$\phi_{XX}(t) = - \int \sum_m x_m(t) \sum_n p_{x_n} \frac{\partial \rho_e}{\partial H_Q^{(n)}} \prod_{i=1}^N dx_i dy_i dp_{x_i} dp_{y_i}. \quad (4.7)$$

Como dito na seção anterior, consideramos o equilíbrio inicial do banho, impondo a não interação entre os Potenciais Quárticos. Consideraremos, inicialmente, que todos os membros do banho têm a mesma energia, E_Q , em $t = 0$. Por isso, utilizaremos a distribuição *pseudo-microcanônica*

$$\rho_e = \frac{\delta(H_Q^{(1)} - E_Q^{(1)}) \delta(H_Q^{(2)} - E_Q^{(2)}) \cdots \delta(H_Q^{(N)} - E_Q^{(N)})}{\int \prod_{i=1}^N \delta(H_Q^{(i)} - E_Q^{(i)}) \prod_{i=1}^N dx_i dy_i dp_{x_i} dp_{y_i}} = \frac{1}{Z} \prod_{i=1}^N \delta(H_Q^{(i)} - E_Q^{(i)}) \quad (4.8)$$

como a distribuição de equilíbrio inicial. Vale ressaltar que, caso tivéssemos escolhido a distribuição *pseudo-canônica*, não haveria qualquer alteração nos procedimentos que serão adotados. É por esta razão que mantivemos os índices de 1 a N na distribuição acima. Podemos adiantar que a escolha da distribuição *pseudo-microcanônica* nos permitirá, não só, reproduzir os resultados de Bonança e Aguiar, como, também, justificar a reescala da constante de acoplamento.

Dando sequência ao cálculo de $\phi_{XX}(t)$, substituímos a expressão (4.8) na equação (4.7) e obtemos

$$\phi_{XX}(t) = - \frac{1}{Z} \int \sum_{m,n} x_m(t) p_{x_n} \frac{\partial}{\partial H_Q^{(n)}} \left[\prod_{i=1}^N \delta(H_Q^{(i)} - E_Q^{(i)}) \right] \prod_{i=1}^N dx_i dy_i dp_{x_i} dp_{y_i}. \quad (4.9)$$

Podemos resolver a integral acima utilizando a parametrização para o Potencial Quártico dadas pelas

equações (3.10) a (3.13), reescritas abaixo

$$\begin{aligned} x_i^2 &= \sqrt{\frac{2H_Q^{(i)}}{\cos 2\theta_i}} \left[\frac{\cos \theta_i}{\sqrt{1+\beta}} + \frac{\sin \theta_i}{\sqrt{1-\beta}} \right] \sin \xi \\ y_i^2 &= \sqrt{\frac{2H_Q^{(i)}}{\cos 2\theta_i}} \left[\frac{\cos \theta_i}{\sqrt{1+\beta}} - \frac{\sin \theta_i}{\sqrt{1-\beta}} \right] \sin \xi \\ p_{xi} &= \sqrt{2H_Q^{(i)}} \cos \varphi_i \cos \xi_i \\ p_{yi} &= \sqrt{2H_Q^{(i)}} \sin \varphi_i \cos \xi_i. \end{aligned}$$

Desta forma, vamos transformar a integral (4.9), calculada em termos das variáveis originais, numa integral em termos do conjunto de variáveis $(H_Q^{(i)}, \theta_i, \varphi_i, \xi_i)$ e isso nos permitirá eliminar a função delta do integrando. Calculando o Jacobiano da transformação

$$J = \begin{vmatrix} J(H_Q^{(1)}, \theta_1, \varphi_1, \xi_1) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & J(H_Q^{(2)}, \theta_2, \varphi_2, \xi_2) & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & J(H_Q^{(N)}, \theta_N, \varphi_N, \xi_N) \end{vmatrix}$$

onde $J(H_Q^{(i)}, \theta_i, \varphi_i, \xi_i)$ é o Jacobiano de cada sistema do banho, dado por,

$$J(H_Q^{(i)}, \theta_i, \varphi_i, \xi_i) = \begin{vmatrix} \frac{\partial x_i}{\partial H_Q^{(i)}} & \frac{\partial x_n}{\partial \theta_i} & \frac{\partial x_n}{\partial \varphi_i} & \frac{\partial x_n}{\partial \xi_i} \\ \frac{\partial y_n}{\partial H_Q^{(i)}} & \frac{\partial y_n}{\partial \theta_i} & \frac{\partial y_n}{\partial \varphi_i} & \frac{\partial y_n}{\partial \xi_i} \\ \frac{\partial p_{x_n}}{\partial H_Q^{(i)}} & \frac{\partial p_{x_n}}{\partial \theta_i} & \frac{\partial p_{x_n}}{\partial \varphi_i} & \frac{\partial p_{x_n}}{\partial \xi_i} \\ \frac{\partial p_{y_n}}{\partial H_Q^{(i)}} & \frac{\partial p_{y_n}}{\partial \theta_i} & \frac{\partial p_{y_n}}{\partial \varphi_i} & \frac{\partial p_{y_n}}{\partial \xi_i} \end{vmatrix},$$

encontramos

$$J = \left(H_Q^{(1)} H_Q^{(2)} \cdots H_Q^{(N)} \right)^{1/2} [f_Q(\theta_1, \varphi_1, \xi_1) f_Q(\theta_2, \varphi_2, \xi_2) \cdots f_Q(\theta_N, \varphi_N, \xi_N)], \quad (4.10)$$

onde a função $f_Q(\theta, \varphi, \xi) = \prod_{i=1}^N f_Q(\theta_i, \varphi_i, \xi_i)$ carrega somente informação das variáveis angulares da parametrização. Desta forma, substituindo (4.10) na equação (4.9) temos

$$\begin{aligned}
\phi_{XX}(t) &= -\frac{1}{Z} \int \sum_{m,n} x_m(t) p_{xn} \frac{\partial}{\partial H_Q^{(n)}} \left[\prod_{i=1}^N \delta(H_Q^{(i)} - E_Q^{(i)}) \right] J \prod_{i=1}^N dH_Q^{(i)} d\Theta_i \\
&= \frac{1}{Z} \int \sum_{m,n} \frac{\partial}{\partial H_Q^{(n)}} (J x_m(t) p_{xn}) \prod_{i=1}^N \delta(H_Q^{(i)} - E_Q^{(i)}) \prod_{i=1}^N dH_Q^{(i)} d\Theta_i \\
&= \int \sum_{m,n} \frac{\partial}{\partial H_Q^{(n)}} (J x_m(t) p_{xn}) \left[\frac{\prod_{i=1}^N \delta(H_Q^{(i)} - E_Q^{(i)})}{Z} \right] \prod_{i=1}^N dH_Q^{(i)} d\Theta_i
\end{aligned}$$

onde $d\Theta_i = d\theta_i d\varphi_i d\xi_i$. Identificando o termo entre colchetes como a distribuição inicial e retornando às variáveis originais chegamos a

$$\begin{aligned}
\phi_{XX}(t) &= \int \sum_{m,n} \frac{\partial}{\partial H_Q^{(n)}} (J x_m(t) p_{xn}) \rho_e \frac{1}{J} \prod_{i=1}^N dx_i dy_i dp_{xi} dp_{yi} \\
&= \int \sum_{m,n} \left[x_m(t) p_{xn}(0) \frac{1}{J} \frac{\partial J}{\partial H_Q^{(n)}} + \frac{\partial}{\partial H_Q^{(n)}} (x_m(t) p_{xn}(0)) \right] \rho_e \prod_{i=1}^N dx_i dy_i dp_{xi} dp_{yi} \\
&= \left\langle \sum_{m,n} x_m(t) p_{xn}(0) \frac{1}{J} \frac{\partial J}{\partial H_Q^{(n)}} \right\rangle_0 + \left\langle \sum_{m,n} \frac{\partial}{\partial H_Q^{(n)}} (x_m(t) p_{xn}(0)) \right\rangle_0. \tag{4.11}
\end{aligned}$$

Olhando para o primeiro termo depois da igualdade na equação (4.11) acima temos

$$\frac{1}{J} \frac{\partial J}{\partial H_Q^{(n)}} = \frac{1}{2} \frac{(H_Q^{(n)})^{-\frac{1}{2}} (H_Q^{(1)} H_Q^{(2)} \dots H_Q^{(n-1)} H_Q^{(n+1)} \dots H_Q^{(N)})^{1/2}}{(H_Q^{(1)} H_Q^{(2)} \dots H_Q^{(N)})^{1/2}} = \frac{1}{2H_Q^{(n)}},$$

daí, inserindo-o na equação(4.11) encontramos

$$\begin{aligned}
\phi_{XX}(t) &= \left\langle \sum_{m,n} \frac{1}{2H_Q^{(n)}} x_m(t) p_{xn}(0) \right\rangle_0 + \left\langle \sum_{m,n} \frac{\partial}{\partial H_Q^{(n)}} (x_m(t) p_{xn}(0)) \right\rangle_0 \\
&= \frac{1}{2E_Q} \left\langle \sum_{m,n} x_m(t) p_{xn}(0) \right\rangle_0 + \left\langle \sum_{m,n} \frac{\partial}{\partial H_Q^{(n)}} (x_m(t) p_{xn}(0)) \right\rangle_0, \tag{4.12}
\end{aligned}$$

uma vez que todas as derivadas em relação aos Hamiltonianos individuais $H_Q^{(i)}$ são tomadas em $H_Q^{(i)} = E_Q$, $i = 1, \dots, N$. O primeiro termo da equação (4.12) está escrito em termos de uma função de autocorrelação entre as variáveis dinâmicas do banho. No segundo termo ainda aparece um derivada em relação a $H_Q^{(i)}$ que pode ser eliminada usando a propriedade de reescala do Potencial Quártico.

Como vimos na seção 3.2.1, podemos escrever a dependência de x_n , p_{xn} e t com a energia do sistema. Portanto, se supormos que conhecemos a dinâmica no equilíbrio para a energia $E_Q^{(n)}$, utilizando as equações (3.3), (3.4) e (3.5) podemos reescrever

$$\frac{\partial}{\partial H_Q^{(n)}} (x_m(t)p_{xn}(0)) = \frac{\partial}{\partial H_Q^{(n)}} \left[\left(\frac{H_Q^{(n)}}{E_Q^{(n)}} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{H_Q^{(m)}}{E_Q^{(m)}} \right)^{\frac{1}{4}} x'_m(t)p'_{xn}(0) \right].$$

Dividiremos o cálculo da derivada, acima, em dois casos:

Para $m = n$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial H_Q^{(n)}} (x_n(t)p_{xn}(0)) &= \frac{\partial}{\partial H_Q^{(n)}} \left[\left(\frac{H_Q^{(n)}}{E_Q^{(n)}} \right)^{\frac{3}{4}} x'_n(t)p'_{xn}(0) \right] \\ &= \frac{3}{4} \frac{1}{E_Q^{(n)}} x'_n(t)p'_{xn}(0) + p'_{xn}(0) \frac{\partial}{\partial H_Q^{(n)}} x'_n(t) \\ &= \frac{3}{4} \frac{1}{E_Q^{(n)}} x'_n(t)p'_{xn}(0) + p'_{xn}(0) \frac{dx'_n}{dt'} \frac{dt'}{dH_Q^{(n)}} \\ &= \frac{3}{4E_Q^{(n)}(0)} x'_n(t)p'_{xn}(0) + \frac{t}{4E_Q^{(n)}(0)} p'_{xn}(0)p'_{xn}(t). \end{aligned} \quad (4.13)$$

Para $m \neq n$

$$\frac{\partial}{\partial H_Q^{(n)}} (x_m(t)p_{xn}(0)) = \frac{1}{2E_Q^{(n)}(0)} x'_m(t)p'_{xn}(0). \quad (4.14)$$

Desta forma, de equação (??) a função resposta do banho será

$$\begin{aligned} \phi_{XX}(t) &= \frac{1}{2E_Q(0)} \left\langle \sum_{m \neq n} x_m(t)p_{xn}(0) \right\rangle_0 + \frac{1}{2E_Q(0)} \left\langle \sum_n x_n(t)p_{xn}(0) \right\rangle_0 + \\ &\quad \frac{3}{4E_Q(0)} \left\langle \sum_n x_n(t)p_{xn}(0) \right\rangle_0 + \frac{t}{4E_Q(0)} \left\langle \sum_n p_{xn}(t)p_{xn}(0) \right\rangle_0, \end{aligned}$$

ou seja,

$$\begin{aligned} \phi_{XX}(t) &= \frac{1}{E_Q(0)} \left\langle \sum_{m \neq n} x_m(t)p_{xn}(0) \right\rangle_0 + \frac{5}{4E_Q(0)} \left\langle \sum_n x_n(t)p_{xn}(0) \right\rangle_0 + \frac{t}{4E_Q(0)} \left\langle \sum_n p_{xn}(t)p_{xn}(0) \right\rangle_0 \\ &= \frac{1}{E_Q(0)} \left\langle \sum_{m \neq n} x_m(t)p_{xn}(0) \right\rangle_0 + \sum_n \left[\frac{5}{4E_Q(0)} \langle x_n(t)p_{xn}(0) \rangle_0 + \frac{t}{4E_Q(0)} \langle p_{xn}(t)p_{xn}(0) \rangle_0 \right] \end{aligned} \quad (4.15)$$

O termo entre colchetes da equação (4.15) é, justamente, a função resposta,

$$\phi_{xx}(t-s) = \frac{5}{4E_Q(0)} \langle x(t)p_x(s) \rangle_0 + \frac{(t-s)}{4E_Q(0)} \langle p_x(t)p_x(s) \rangle_0,$$

obtida por Bonança e Aguiar, para o caso em que $N = 1$. Portanto, a função resposta do banho composto por N Sistemas Quárticos contém uma soma sobre as funções resposta individuais de cada sistema caótico. Note que as funções de correlação que aparecem no segundo termo da equação (4.15) são produtos de funções correspondentes ao mesmo sistema caótico e por essa razão, daremos o nome de **funções de correlação diagonais**. Por outro lado, o primeiro termo da eq. (4.15), descreve a correlação temporal entre a posição e o momento de distintos membros do banho, o que chamaremos de **funções de correlação cruzada**. No entanto, como foi enfatizado na seção anterior, a média das funções de correlação da função resposta (4.15) são tomadas na distribuição inicial *pseudo-microcanônica*, o que significa dizer que os sistemas são não interagentes. Estando desacoplados, é natural pensar que o termo cruzado $\left\langle \sum_{m \neq n} x_m(t)p_{xn}(0) \right\rangle_e$ é muito pequeno, quando comparado aos termos diagonais e que, por isso, pode ser desprezado. Quanto mais caótica a dinâmica dos membros do banho, menor será a correlação cruzada e, portanto, melhor será a aproximação. Na verdade podemos mostrar que o termo cruzado, no nosso caso, deve ser nulo. De fato, como vimos

$$\begin{aligned} \left\langle \sum_{m \neq n} x_m(t)p_{xn}(0) \right\rangle_e &= \frac{1}{Z} \int \sum_{m \neq n} x_m(t)p_{xn} \left[\prod_{i=1}^N \delta(H_Q^{(i)} - E_Q^{(i)}) \right] \prod_{i=1}^N dx_i dy_i dp_{xi} dp_{yi} \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{m \neq n} \int [x_m(t) \delta(H_Q^{(m)} - E_Q^{(m)}) dx_m dy_m dp_{xm} dp_{ym}] \times \\ &\quad [p_{xn} \delta(H_Q^{(n)} - E_Q^{(n)}) dx_n dy_n dp_{xn} dp_{yn}] \\ &= \sum_{m \neq n} \left[\frac{1}{Z_m} \int x_m(t) \delta(H_Q^{(m)} - E_Q^{(m)}) dx_m dy_m dp_{xm} dp_{ym} \right] \times \\ &\quad \left[\frac{1}{Z_n} \int p_{xn} \delta(H_Q^{(n)} - E_Q^{(n)}) dx_n dy_n dp_{xn} dp_{yn} \right] \\ &= \sum_{m \neq n} \left[\int x_m(t) \rho_e^{(m)} dx_m dy_m dp_{xm} dp_{ym} \right] \times \\ &\quad \left[\int p_{xn} \rho_e^{(n)} dx_n dy_n dp_{xn} dp_{yn} \right] \\ &= \sum_{m \neq n} \langle x_m(t) \rangle_0 \langle p_{xn}(0) \rangle_0 = 0, \end{aligned}$$

uma vez que $\langle x_m(t) \rangle_0 = 0$ para todo n . O fato de o termo cruzado ser nulo é um reflexo direto da escolha que fizemos para a condição inicial do banho. Como já dissemos, ao utilizarmos as distribuições *pseudo-*

microcanônica ou a *pseudo-canônica*, estamos impondo, por exemplo, que as trajetórias de dois sistemas do ambiente estão completamente descorrelacionadas, justificando a ausência do termo cruzado. Por outro lado, por exemplo, caso desejássemos distribuir as energias dos quárticos segundo um ensemble microcanônico ou canônico genuínos, não há razão para que o termo cruzado seja nulo, uma vez que cada quártico pode estar ligado com os demais. Assim, é possível enxergar o termo cruzado como a contribuição de mais baixa ordem para descrever o processo de interação entre os elementos do banho. No nosso problema, esta interação não existe, pois cada sistema está confinado à sua própria superfície de energia. Portanto, para o caso em que a distribuição de energia inicial é a *pseudo-microcanônica*, obtemos

$$\phi_{XX}(t-s) = \sum_n \left[\frac{5}{4E_Q^{(n)}(0)} \langle x_n(t)p_{xn}(0) \rangle_e + \frac{t-s}{4E_Q^{(n)}(0)} \langle p_{xn}(t)p_{xn}(0) \rangle \right] = N\phi_{xx}(t-s). \quad (4.16)$$

ou seja, a resposta do banho composto por N sistemas Quárticos, corresponde à soma da função resposta para um único sistema. Logo, no regime de resposta linear, o efeito do banho é amplificar a resposta de um único sistema. A equação (4.16) deixa evidente a necessidade de reescalar a constante de acoplamento para evitar a divergência na energia de interação no limite termodinâmico. Inserindo a função resposta total (4.16) na equação (2.26) temos

$$\ddot{q} + \omega_0^2 q = \frac{\lambda^2 N}{m} \int_0^t \phi_{xx}(t-s)q(s)ds.$$

Note, portanto, que reescalando a constante de acoplamento da seguinte maneira,

$$\lambda \rightarrow \lambda_N = \frac{\lambda}{\sqrt{N}},$$

somos capazes de construir um ambiente externo para o qual a força sobre o oscilador independe do tamanho do sistema, para N suficientemente grande. Isto nos leva às curvas de dissipação independentes de N exibidas nos resultados numéricos do capítulo anterior.

A escolha da distribuição inicial *pseudo-microcanônica* permite-nos demonstrar a necessidade da reescala do acoplamento, mas não nos permite aplicar a TRL para a descrição dinâmica do sistema a tempos longos. Isso ocorre porque a distribuição *pseudo-microcanônica* varia muito rapidamente quando o acoplamento é ligado, como pode ser visto na fig. 4.3.

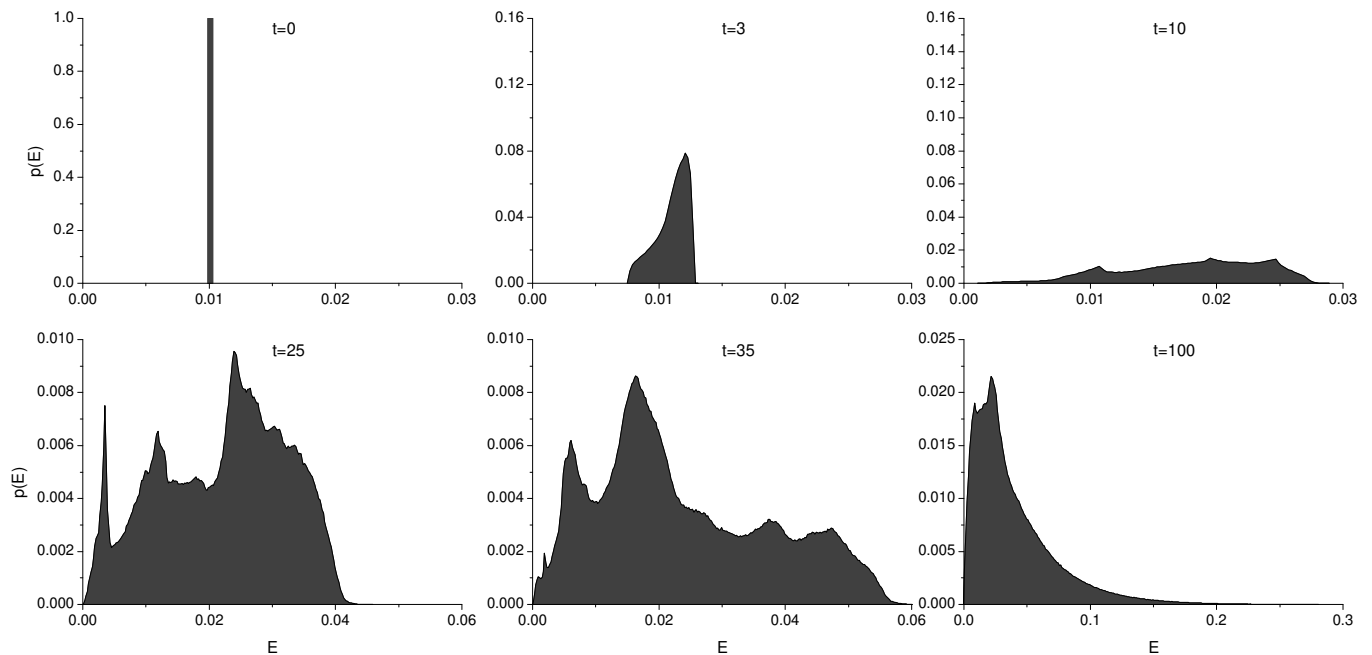


Figura 4.3: “Desmoronamento” da distribuição *pseudo-microcanônica* inicial à medida que o tempo evolui. A interação entre os membros do banho redistribui a energia levando a uma distribuição do tipo Boltzmann. Em $t = 0$, ρ_e é dado pela equação com (4.8), com $E_Q^{(i)} = 0.01$ para todos os SQ’s e $N = 100$.

Fica evidente que a interação indireta entre os SQ’s redistribui a energia, conduzindo o ambiente a uma distribuição do tipo Boltzmann. Analisando os resultados da seção 3.4.5 podemos dar uma interpretação para este resultado sobre a evolução da distribuição inicial. Cada elemento do banho enxerga o restante do sistema como um reservatório térmico com N partículas (oscilador + $(N - 1)$ SQ’s) e por isso, cada um tende a uma distribuição de Boltzmann no equilíbrio. Por esta razão, se desejamos utilizar a TRL para descrever a dinâmica do sistema a tempos longos, somos obrigados a descartar a distribuição *pseudo-microcanônica* como a distribuição inicial e substituí-la pela *pseudo-canônica*.

4.3 A Teoria de Resposta Linear para tempos longos

Parece intuitivo que a distribuição de equilíbrio natural do banho seja dada pela distribuição de Boltzmann, reforçando a ideia de que o ambiente externo atua como um reservatório térmico para cada elemento do banho. Obviamente, a distribuição *pseudo-canônica* não leva em consideração a interação entre os elementos do ambiente, mas é capaz de fazer uma mímica do estabelecimento de uma temperatura inicial. Isso porque, como vimos, apesar de cada sistema estar confinado à sua

própria superfície de energia, cada uma delas é sorteada segundo a distribuição de probabilidade $p(E) = \exp(-E/\bar{E}_Q)/\bar{E}_Q$. Desta maneira, simulamos a presença de um banho com uma temperatura inicial pré-definida $\bar{E}_Q = kT$. Deste modo, se a temperatura (distribuição) inicial do banho não variar muito com a evolução temporal do sistema, podemos concluir que o ambiente praticamente não é afetado pela dinâmica do oscilador e, mesmo que as interações secundárias entre os QS's promovam flutuações de energia significativas em cada elemento do banho, o efeito macroscópico destas flutuações é insignificante. A fig.4.4 mostra um exemplo com $N = 100$ e $\bar{E}_Q = 0.01$ onde a distribuição de energia do ambiente não varia muito com o tempo.

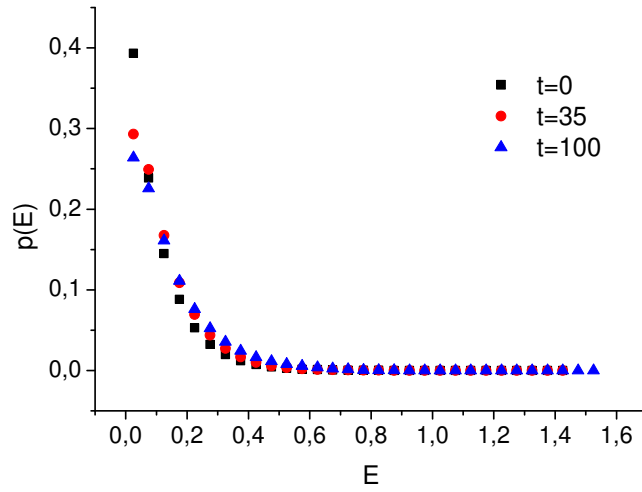


Figura 4.4: Distribuição de energia do ambiente para diferentes instantes de tempo para $N = 100$. Em $t = 0$ $p(E) = \exp(-E/\bar{E}_Q)/\bar{E}_Q$, com $\bar{E}_Q = 0.01$.

Portanto, para N suficientemente grande, podemos estabelecer um regime onde o sistema central dissipa energia exponencialmente, mas a temperatura do banho permanece aproximadamente constante, o que nos permite utilizar a teoria de resposta linear para o estudo da dinâmica do sistema para tempos longos. Como vimos na equação (4.16), a função resposta total é dada em termos de médias das funções de correlação entre as variáveis dinâmicas do banho, que podem ser reescritas, em termos de derivadas temporais, como

$$\sum_n x_n(t)p_{xn}(s) = \frac{d}{ds} \sum_n x_n(t)x_n(s) \quad (4.17)$$

e

$$\sum_n p_{x_m}(s)p_{x_n}(s) = \frac{d^2}{dtds} \sum_n x_n(t)x_n(s). \quad (4.18)$$

Assim a função resposta do banho fica

$$\phi_{XX}(t-s) = \frac{5}{4} \frac{d}{ds} \left\langle \sum_n \frac{1}{E_Q^{(n)}(0)} x_n(t)x_n(s) \right\rangle_0 + \frac{(t-s)}{4} \frac{d^2}{dtds} \left\langle \sum_n \frac{1}{E_Q^{(n)}(0)} x_n(t)x_n(s) \right\rangle_0. \quad (4.19)$$

Neste ponto, é essencial que conheçamos o comportamento da função de correlação total

$$C_N(t, s) = \left\langle \sum_{n=1}^N \frac{1}{E_Q^{(n)}(0)} x_n(t)x_n(s) \right\rangle_0. \quad (4.20)$$

Na seção anterior, quando lidamos com o caso no qual a distribuição de equilíbrio inicial é *pseudo-microcanônica* com energia E_0 , podemos verificar que a soma das correlações médias é equivalente a N vezes a correlação média de um único sistema quártico (ver eq. (4.16)). Como, no equilíbrio, as funções de correlação individuais

$$c_n(t, s) = \left\langle \frac{1}{E_0} x_n(t)x_n(0) \right\rangle_0 \quad (4.21)$$

seguem o comportamento esperado para sistemas caóticos [43],

$$c_n(t, s) = \frac{1}{E_0} \sigma e^{-\nu t} \cos \alpha t$$

podemos mostrar, no caso em que $E_n = E_0$ para todo n , que a função de correlação total do banho é uma amplificação da correlação individual, dada por

$$C_N(t, s) = \frac{N}{E_0} \sum_{n=1}^N \sigma e^{-\nu t} \cos \alpha t.$$

No entanto, quando a distribuição de equilíbrio inicial é *pseudo-canônica*, ou seja, quando os elementos do banho possuem diferentes energias respeitando a distribuição de Boltzmann, devemos esperar algumas alterações. Uma maneira de analisar o que muda no comportamento de $C_N(t, s)$ quando definimos uma temperatura inicial, é utilizar a propriedade de reescala do Potencial Quártico. De fato, se escrevermos a função de correlação média individual como

$$c_n(t, s) = \left\langle \frac{1}{E_0} x_{n0}(t)x_{n0}(0) \right\rangle_0$$

onde o subscrito “ $n0$ ” indica que a trajetória esta sendo tomada na superfície de energia E_{n0} para o n -ésimo elemento do banho e, por simplicidade, tomarmos $s = 0$, podemos utilizar a propriedade de reescala do potencial quártico, eqs. (3.4) e (3.5), para reescrever a correlação total do banho, no caso

de diferentes superfícies de energia $E_Q^{(n)}$, como

$$\begin{aligned}
C_N(t, s) &= \left\langle \sum_{n=1}^N \frac{1}{E_Q^{(n)}} x_n(t') x_n(0) \right\rangle = \left\langle \sum_{n=1}^N \frac{1}{E_Q^{(n)}} \left(\frac{E_Q^{(n)}}{E_0} \right)^{\frac{1}{4}} x_{n0}(t) \left(\frac{E_Q^{(n)}}{E_0} \right)^{\frac{1}{4}} x_{n0}(0) \right\rangle_e \\
&= \sum_{n=1}^N \frac{1}{E_Q^{(n)}} \sigma_{n0} \left(\frac{E_Q^{(n)}}{E_0} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\nu_{n0} t'} \cos \alpha_{n0} t' \\
&= \sum_{n=1}^N \frac{1}{E_Q^{(n)}} \sigma_{n0} \left(\frac{E_Q^{(n)}}{E_0} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\nu_{n0} \left(\frac{E_0}{E_Q} \right)^{\frac{1}{2}} t} \cos \left[\alpha_{n0} \left(\frac{E_Q^{(n)}}{E_0} \right)^{\frac{1}{2}} t \right] \\
&= \sum_{n=1}^N \frac{1}{E_Q^{(n)}} \sigma_n(E_Q^{(n)}) e^{-\nu_n(E_Q^{(n)}) t} \cos [\alpha_n(E_Q^{(n)}) t]. \tag{4.22}
\end{aligned}$$

A equação (4.22) nos mostra que a distribuição de energia entre os elementos do banho reescala as amplitudes ($\sigma_n(E_Q^{(n)})$), os tempos característicos ($\nu_n(E_Q^{(n)})$) e as frequências, ($\alpha_n(E_Q^{(n)})$) associados a cada correlação individual.

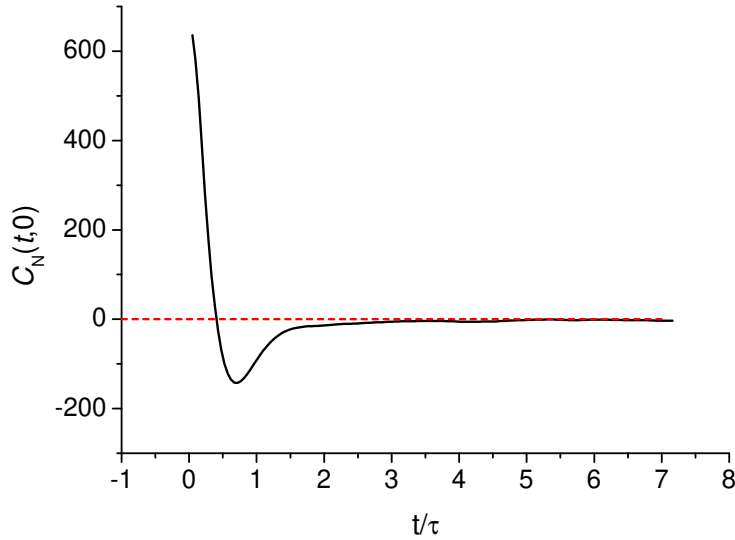


Figura 4.5: A função de correlação total $C_N(t, 0) = \sum_n c_n(t, 0)$ com $n = 1, \dots, N = 100$ sistemas quárticos obedecendo à distribuição *pseudo-canônica* com $\bar{E} = 0.01$.

Com isso, podemos mostrar que a soma da contribuição individual das trajetórias em diferentes superfícies de energia atenua as oscilações da correlação total $C_N(t, s)$ exibidas no caso *pseudo-microcanônico*. Isto está de acordo com a noção intuitiva de que trajetórias em diferentes superfícies, por serem independentes uma da outra estão completamente descorrelacionadas e, desta forma, contri-

buam para a atenuação destas oscilações da função de correlação total do banho. Quando analisamos a fig. 4.5, notamos que é, justamente, isso o que acontece e também podemos perceber que a escala de tempo onde $C_N(t, s)$ é significativo, é muito menor do que a escala de tempo da dissipação (ver fig. 3.14).

Logo, na escala de tempo da dissipação, podemos fazer a seguinte aproximação

$$C_N(t, s) = \left\langle \sum_{n=1}^N \frac{1}{E_Q^{(n)}(0)} x_n(t) x_n(s) \right\rangle_0 = A_N \delta(t - s) \quad (4.23)$$

onde A_N é a amplitude máxima de $C_N(t, s)$. Podemos mostrar que A_N depende linearmente de N , como é visto na fig. 4.6.

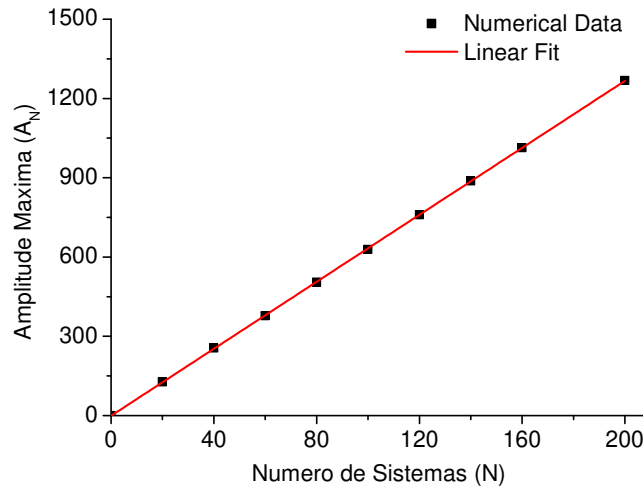


Figura 4.6: Dependência linear entre a amplitude máxima da função de correlação do banho $C_N(t, 0)$ e o número de sistemas no ambiente. A inclinação depende da energia média do reservatório.

Escrevemos, portanto, $A_N = \mu_{\bar{E}} N$, onde $\mu_{\bar{E}}$ é o coeficiente angular desta função linear. O índice \bar{E} expressa a dependência de coeficiente angular de A_N com energia média do reservatório, como veremos mais adiante.

É interessante salientar que a equação (4.23) indica que a presença do caos introduz uma rápida perda de memória na dinâmica microscópica do reservatório, de tal forma que a evolução temporal pode ser descrita por um processo Markoviano, diferentemente do que ocorre nos regimes integrável e misto. Desta maneira, a introdução do caos no banho atua como um “catalizador” para o surgimento de um regime estocástico no banho, uma vez que a aproximação (4.23) é válida para N finito, diferentemente do que ocorre no modelo Caldeira-Leggett, por exemplo.

Substituindo a expressão (4.23) na equação (4.19) chegamos, finalmente, à seguinte função resposta

$$\phi_{XX}(t-s) = \frac{5A_N}{4E_Q^{(n)}(0)} \frac{d}{ds} \delta(t-s) + \frac{A_N(t-s)}{4E_Q^{(n)}(0)} \frac{d^2}{dtds} \delta(t-s). \quad (4.24)$$

Inserindo $\phi_{XX}(t-s)$, dada acima, na equação de movimento (4.6) temos

$$\begin{aligned} \ddot{q} + \omega_0^2 q &= \frac{\lambda^2}{m} \int_0^t \left\{ \frac{5A_N}{4} \frac{d}{ds} \delta(t-s) + \frac{A_N(t-s)}{4} \frac{d^2}{dtds} \delta(t-s) \right\} q(s) ds \\ &= \frac{\lambda^2}{m} \left[\frac{5A_N}{4} \int_0^t q(s) \frac{d}{ds} \delta(t-s) ds + \frac{A_N}{4} \int_0^t q(s)(t-s) \frac{d}{dt} \left[\frac{d}{ds} \delta(t-s) \right] ds \right] \\ &= -\frac{5\lambda^2 A_N}{8m} \dot{q}(t) + \frac{\lambda^2 A_N}{4m} \dot{q}(t) \\ &= -\frac{3\lambda^2 A_N}{8m} \dot{q}(t) \end{aligned}$$

ou seja,

$$\ddot{q}(t) + \omega_0^2 q(t) + \gamma_T \dot{q}(t) = 0 \quad (4.25)$$

onde

$$\gamma_T = \frac{3\lambda^2 \mu_E N}{8m}. \quad (4.26)$$

Os passos para o cálculo da integral

$$\int_0^t q(s)(t-s) \frac{d}{dt} \left[\frac{d}{ds} \delta(t-s) \right] ds$$

são dados no apêndice B.

Portanto, o acoplamento bilinear com as coordenadas do banho atua como uma espécie de força flutuante, cujo o efeito médio é simular a presença de um meio viscoso com constante de arrasto γ_T . Além disso, é preciso enfatizar que, mais uma vez, é possível justificar a reescala da constante de acoplamento. No caso da distribuição inicial *pseudo-canônica* não podemos afirmar que $\phi_{XX}(t-s) = N\phi_{xx}$, mas se olharmos para a constante de arrasto podemos, facilmente, verificar que γ_T fica independente do tamanho do sistema quando reescalamos a constante de acoplamento por $\lambda_N = \lambda/\sqrt{N}$. Outro ponto importante, é notar que a constante de arrasto depende da energia. Este é um aspecto muito interessante, pois esperamos que isto, de fato, aconteça. Por exemplo, é razoável pensar que banhos mais quentes sejam menos eficientes do que banhos frios para dissipar a energia do sistema de interesse. Os resultados numéricos nos permitem mostrar que a constante de arrasto teórica γ_T , obtida a partir da teoria de resposta linear, decresce exponencialmente com a energia, como mostram

os quadrados vermelhos na figura 4.7-(b) .

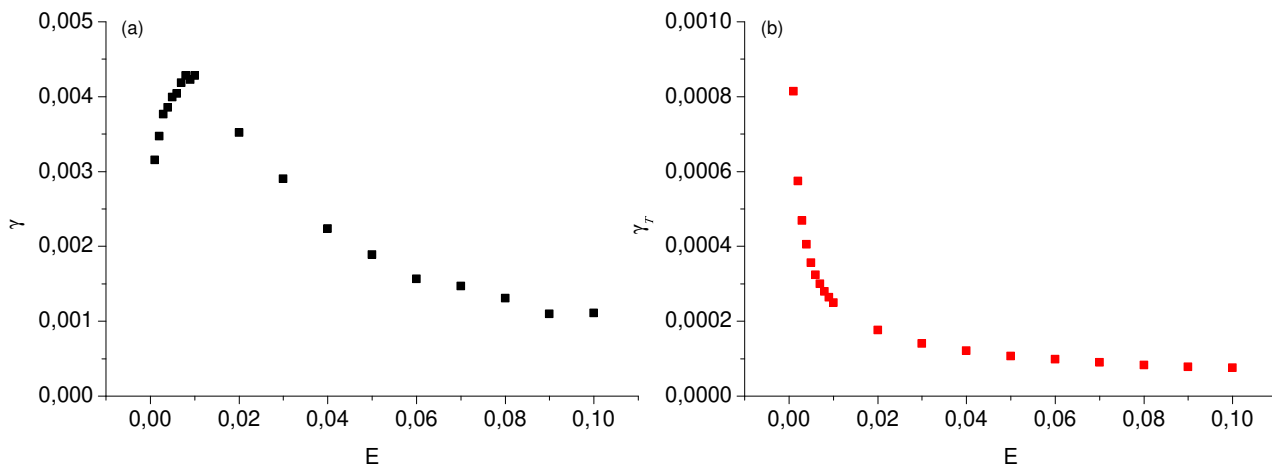


Figura 4.7: A constante de arrasto como função da energia média do reservatório para: os dados numéricos (γ , painel (a)); e o modelo teórico (γ_T , painel (b)).

Por outro lado, ao calcularmos a constante de arrasto numérica (γ), a partir do fit exponencial das curvas de dissipação, obtemos um comportamento um pouco mais complexo (ver quadrados pretos na fig. 4.7-(a)). Este resultado pode ser dividido em duas partes: na primeira, $0 < \bar{E} < 0.01$ e $\gamma(\bar{E})$ cresce com a energia média do reservatório; no segundo regime, $\bar{E} > 0.01$ e $\gamma(\bar{E})$ decresce com \bar{E} .

As discrepâncias entre os comportamentos de $\gamma_T(\bar{E})$ e $\gamma(\bar{E})$ podem ser compreendidas se notarmos que no primeiro intervalo de $\gamma(\bar{E})$, onde \bar{E} é pequeno, os SQ's são muito lentos. Como o valor de γ_T está relacionado com a função de correlação do banho $C_N(t, s)$, seu valor aumenta consideravelmente neste regime pois mudanças no estado dos SQ's são lentas. Isto, portanto, implica num valor maior de γ_T . Ainda neste regime, podemos notar que os resultados numéricos mostram que, à medida que \bar{E} cresce, a influência do ambiente sobre o oscilador aumenta, facilitando o fluxo de energia e aumentando γ . Este é um efeito não trivial, uma vez que um ambiente com energia média baixa deveria corresponder a um banho térmico a baixas temperaturas, ou seja, com uma taxa de dissipação alta. Este resultado mostra, portanto, que o conjunto finito de sistemas quárticos não pode ser tratado como um banho térmico a temperaturas muito baixas.

Para valores maiores de energia, γ recupera o comportamento decrescente esperado e a associação entre a energia média e temperatura é restaurada. Mesmo neste caso, onde o comportamento qualitativo de γ e γ_T é o mesmo, os resultados numéricos destes coeficientes necessitam de correções. Para isto, definimos o parâmetro $\kappa_{\bar{E}} = \gamma/\gamma_T$ de forma a ajustar os resultados do modelo teórico e numérico. Quando isto é feito, as curvas obtidas a partir da solução da equação (4.25) e dos resultados numéricos são praticamente idênticas, como mostra a fig. 4.8.

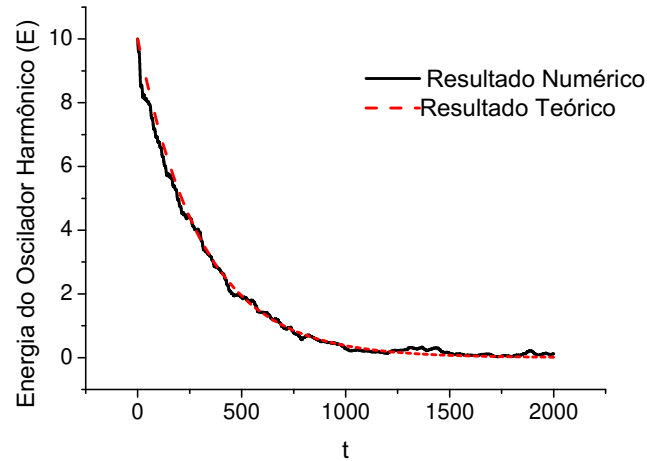


Figura 4.8: Comparação entre as curvas de dissipação obtidas a partir dos resultados numéricos (linha preta contínua) e o modelo teórico (linha vermelha tracejada), para $N = 100$ e $\kappa_{\bar{E}} = 21.4$.

4.4 Considerações finais

Num regime de acoplamentos fracos, grande parte de toda informação presente na força flutuante $X(t)$ está contida no seu termo perturbativo de mais baixa ordem na constante de acoplamento. O sucesso da aplicação da Teoria de Resposta Linear a este modelo está intimamente ligada à escolha da distribuição inicial de energia invariante (distribuição *pseudo-canônica*). Obviamente, a propriedade de reescala do Potencial Quártico, facilita muito o cálculo da função resposta do sistema, mas como já dissemos, não é um ingrediente fundamental para a eficácia de um determinado sistema caótico como membro de um ambiente dissipativo finito.

Capítulo 5

Conclusões e perspectivas

Construímos um modelo clássico de dissipação onde um oscilador harmônico interage com um ambiente externo composto por um conjunto finito de N subsistemas quárticos com dois graus de liberdade, cujo regime dinâmico é determinado por um único parâmetro de controle. De maneira a evitar a divergência do Hamiltoniano de interação no limite $N \rightarrow \infty$, é necessário a reescala da constante de acoplamento de acordo com o tamanho do sistema ($\lambda_N = \lambda/\sqrt{N}$). As interações entre os subsistemas ocorrem via oscilador, logo são de segunda ordem na constante de acoplamento.

5.1 Principais conclusões

Mostramos no Capítulo 3 que, como era esperado [15], o caos presente no banho é capaz de aumentar a eficiência do fluxo de energia entre o sistema central e o ambiente, independentemente do valor de N . Isto pode ser explicado usando-se o fato de que as trajetórias de cada subsistema atuam como uma parte da força externa total sobre o oscilador harmônico (eq. (4.2)) e, portanto, como no regime caótico a correlação temporal $\langle F(t)F(s) \rangle$ cai muito mais rapidamente do que no regime regular e as flutuações que perturbam a dinâmica do sistema de interesse assemelham-se muito mais a eventos aleatórios, mesmo quando N é pequeno. Entretanto, nestes casos ($N \lesssim 10$), não podemos visualizar a dissipação efetiva, uma vez que as flutuações dinâmicas de ambos os subsistemas são relativamente grandes. Em contrapartida, à medida que aumentamos o número de graus de liberdade no ambiente, verificamos uma drástica diminuição nestas flutuações e um nítido comportamento decrescente na evolução temporal da energia do sistema central. O aumento do número de graus de liberdade amplifica, linearmente com N (ver fig. 4.6), a intensidade da força externa sobre o oscilador, além de ser responsável pelo rápido decaimento da correlação temporal de $\langle F(t)F(s) \rangle$. Por fim, os resultados numéricos nos permitem afirmar que é possível estabelecer um regime em que a dissipação ocorre a uma taxa exponencial e que

o comportamento dinâmico do sistema é independente de N , para N grande. Esta última, é uma das principais consequências da reescala da constante de acoplamento.

O regime dinâmico é extremamente importante para a eficiência da dissipação. A partir do mapeamento da energia média de equilíbrio do oscilador harmônico (fig. 3.17), podemos identificar uma espécie de transição de fases no regime dissipativo, caracterizada pela variação abrupta da energia média de equilíbrio como função do parâmetro de caoticidade. Fica evidente também que, pelo menos neste modelo, passado o intervalo de transição entre regimes ($a \lesssim 0.2$) a caoticidade do sistema não interfere significativamente na eficiência do processo dissipativo.

Outros parâmetros, obviamente, contribuem para a eficiência da dissipação. De fato, no regime de acoplamentos fracos, verificamos, numérica e teoricamente, que, neste modelo, a taxa de dissipação depende quadraticamente do valor da constante de acoplamento. Já a frequência natural do oscilador harmônico atua como parâmetro de controle da velocidade relativa entre o oscilador e cada um dos subsistemas do banho. A dissipação é mais eficiente quando estamos mais próximo do regime adiabático, ou seja, quando a dinâmica do sistema de interesse é muito mais lenta do que a dos elementos que compõem o banho.

A fig. 3.17 também é importante para verificarmos que o teorema de equipartição de energia (TEE), seção 3.5, somente é satisfeito no regime caótico, onde há a concordância entre a razão das energias de equilíbrio do oscilador e de cada sistema quártico. Para o regime altamente caótico $a = 0.01$, mostramos que há ergodicidade no sistema para valores de N relativamente baixos e que a distribuição de energia do oscilador harmônico no equilíbrio, é muito bem descrita pela distribuição de Boltzmann $p(E) = 1/\bar{E}_o \exp(-E/\bar{E}_o)$, na qual o valor médio predito pelo teorema de equipartição concorda muito bem com o valor extraído dos resultados numéricos. Com isso, mostramos que podemos definir uma temperatura de equilíbrio e que o banho, mesmo com um número finito e, relativamente pequeno de graus de liberdade, simula os efeitos de um reservatório térmico infinito, promovendo a dissipação a uma taxa exponencial e a termalização para uma única realização dinâmica do sistema. Este é o principal resultado desta tese.

Ao analisarmos os resultados obtidos, por exemplo, por Bonança e Aguiar [6], podemos afirmar que o caos é o responsável pela estocasticidade da força externa, promovendo a dissipação. Por outro lado, o acoplamento indireto entre os membros do banho permite a redistribuição de energia entre os graus de liberdade do banho possibilitando a termalização. A figura 4.3 evidencia este último resultado, mostrando o desmoronamento da distribuição inicial *pseudo-microcanônica* e o conseqüente rearranjo numa distribuição exponencial (distribuição de Boltzmann), que emerge como a distribuição natural do banho, uma vez que cada elemento do ambiente enxerga o restante do sistema como um reservatório (composto pelo oscilador e $(N - 1)$ sistemas quárticos).

Os resultados numéricos serviram de apoio para a construção um modelo analítico simples, baseado

na teoria de resposta linear, capaz de extrair a manifestação macroscópica da dissipação por meio dos processos microscópicos envolvidos na interação entre os sistemas central e externo. Utilizando dois tipos de distribuições iniciais de energia, a *pseudo-microcanônica* e a *pseudo-canônica*, calculamos o efeito que a dinâmica do oscilador harmônico exerce sobre as trajetórias de cada quártico do banho por meio da função resposta (susceptibilidade dinâmica) do sistema externo. Determinamos a parte linear da força média sentida pelo oscilador em termos das correlações dinâmicas do ambiente e, para a distribuição *pseudo-microcanônica*, justificamos a reescala da constante de acoplamento com o tamanho (N) do sistema. No entanto, a utilização da distribuição *pseudo-microcanônica* impossibilita a aplicação da TRL para a descrição da dinâmica a tempos longos, uma vez que não é satisfeita a hipótese de invariância da distribuição inicial (fig. 4.3). A maneira de se contornar esta dificuldade é definir a distribuição *pseudo-canônica* como a distribuição inicial e definir a temperatura inicial de forma que a temperatura varie lentamente com o fluxo de energia (fig. 4.4). Desta maneira, é possível estender a aplicação da Teoria de Resposta Linear para a descrição dinâmica do sistema central a tempos longos e, conseqüentemente, sua tendência ao equilíbrio.

O modelo permite mostrar, analiticamente, que o efeito líquido da interação com os inúmeros graus de liberdade do banho é o surgimento de um termo dissipativo, proporcional à velocidade, cuja constante de arrasto decai exponencialmente com a energia média inicial do banho (círculos vermelhos na fig. 4.7). Isto reflete a ideia intuitiva de que banhos a temperaturas mais elevadas dissipam menos energia do que banhos mais “frios”. No entanto, a comparação entre os resultados numéricos e teóricos para a constante de arrasto, mostram que há uma discordância qualitativa na região de baixas energias, o que nos leva a crer que devemos ter muito cuidado ao tratamos o banho caótico finito como um reservatório térmico a temperaturas muito baixas. Para temperaturas suficientemente altas, os dois modelos restauram a associação natural entre energia média e temperatura, levando a excelentes resultados qualitativos do modelo analítico, quando o comparamos com aqueles obtidos através das simulações.

A questão que traçamos como ponto de partida- “*Quais condições devem ser impostas ao ambiente de forma que ocorra dissipação efetiva?*”-foi respondida e nos possibilitou visualizar uma série de resultados bastante interessantes, dentre os quais o principal é a termalização por meio da dissipação efetiva.

5.2 Perspectivas e próximos passos

As respostas obtidas neste trabalho motivam uma série de possíveis aplicações do modelo, por exemplo, na construção de termostatos para cálculos numéricos e na análise da relação dissipação-classicalização de estruturas complexas (como a molécula de C_{60}).

Algumas questões ainda precisam ser esclarecidas. Alguns exemplos:

- Por que o Teorema de Equipartição da Energia (TEE) não vale para banhos nos regimes integrável e misto?
- Se levarmos em consideração a interação entre os membros do banho, será que as funções de correlação cruzada (ver pag. 65) permitem ajustar as curvas de dissipação obtidas a partir dos resultados numéricos e teóricos?
- Será que a divergência entre γ_T e γ para baixas temperaturas (fig. 73) está realmente associada ao não cumprimento da hipótese adiabática?

Obviamente, novas questões também aparecem como consequência natural do desenvolvimento do trabalho. Estamos, atualmente, trabalhando nos seguintes problemas:

- Verificar se ambientes caóticos finitos, como os descritos aqui, são capazes de promover processos difusivos.
- Se o TEE é válido para problemas equivalentes, mas com diferentes sistemas de interesse (partícula livre, osciladores não lineares etc).
- Estudar a transição entre os regimes harmônico e caótico, num contexto clássico e quântico, utilizando o Potencial Carmônico introduzido no apêndice C.
- Estudar a possibilidade de transporte de energia entre dois sistemas de interesse acoplados por meio do banho caótico.

Em particular, o último dos problemas citados acima é muito interessante e está em fase final de preparação [44].

5.3 Considerações finais

A simplicidade dos resultados mostrados nesta tese, deve-se, em grande parte, à natureza intuitiva do problema. A possibilidade de um banho caótico, com um número relativamente baixo de graus de liberdade, comportar-se como um reservatório térmico infinito, dá mostras do quanto o caos é importante para o estabelecimento dos processos dinâmicos que conduzem, ao equilíbrio, os sistemas físicos reais.

Apêndice A

O Teorema da Flutuação-Dissipação

Apresentaremos neste apêndice uma dedução do importante Teorema da Flutuação-Dissipação (TFD) dentro do formalismo quântico¹.

O TFD incumbe-se de explicitar como são dadas as relações entre as flutuações em equilíbrio de um sistema e de seu comportamento sob ação de uma força externa. O TFD foi primeiramente descrito por Herbert Nyquist [45], ao analisar a agitação térmica de cargas em um condutor em equilíbrio a partir da relação entre as flutuações quadráticas das correntes internas e a resistência do condutor. Esta primeira formulação é obtida utilizando-se basicamente a 2^a lei da termodinâmica. Posteriormente, Callen e Welton [46] ampliam o alcance da relação, mostrando que a potência dissipada em qualquer sistema linearmente afastado do equilíbrio por uma fonte externa é proporcional ao valor quadrático médio das flutuações do sistema quando em equilíbrio. Por fim, Ryogo Kubo [47] propõe uma generalização do resultado, expressando as flutuações dinâmicas em termos de correlações temporais e relacionando estas com a suscetibilidade do sistema. Segue, portanto, um esboço da demonstração segundo o formalismo de Kubo.

A demonstração será feita dentro de um contexto quântico devido, única e exclusivamente, à simplicidade da notação de Dirac.

Consideremos um sistema que, no equilíbrio, pode ser descrito pelo Hamiltoniano $H_0(q, p)$ e que no instante $t = 0$, este mesmo sistema passe a ser perturbado por uma força flutuante $F(t)$ por meio da interação com o observável $\hat{A}(q, p)$, de forma que o Hamiltoniano perturbado possa ser escrito como

$$\hat{H} = \hat{H}_0(q, p) + F(t)\hat{A}(q, p). \quad (\text{A.1})$$

¹Cabe, aqui, um agradecimento especial ao amigo Fábio Stucchi Vannucchi pela gentileza e generosidade ao ceder o manuscrito da monografia sobre o tema, apresentada no seu Exame de Qualificação do Doutorado neste Instituto. Este apêndice é uma adaptação de parte do conteúdo desta monografia.

Assim como fizemos na seção sobre a teoria de resposta linear, desejamos estudar o efeito da perturbação sobre a evolução temporal de um observável $B(t)$ associado ao sistema de interesse. Para isso, precisamos, primeiramente, escrever a evolução temporal de \hat{A} , utilizando a representação de interação

$$\hat{A}(t) = e^{\frac{t'}{\hbar}\hat{H}_S} \hat{A} e^{-\frac{t'}{\hbar}\hat{H}_S}.$$

Como dissemos, o objetivo é avaliar o efeito da fonte $F(t)$ sobre o sistema através do acompanhamento do observável B , que se acopla internamente ao sistema por meio de A (podemos inclusive ter $B \equiv A$, como estudado no Capítulo 4). Utilizando os resultados de teoria de perturbação, temos que o valor esperado de B , em primeira ordem, sob ação de uma fonte acionada em $t = 0$, é

$$\begin{aligned} B(t) &= \langle \Psi(t) | \hat{B} | \Psi(t) \rangle \\ &= \langle \psi_n^{(0)} | \hat{B} | \psi_n^{(0)} \rangle + \\ &\quad + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \sum_k \langle \psi_n^{(0)} | \hat{B} | \psi_k^{(0)} \rangle e^{i\omega_{nk}t} \langle \psi_k^{(0)} | \hat{A} | \psi_n^{(0)} \rangle e^{i\omega_{kn}t'} F(t') dt' - \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \sum_k \langle \psi_n^{(0)} | \hat{A} | \psi_k^{(0)} \rangle e^{i\omega_{nk}t'} \langle \psi_k^{(0)} | \hat{B} | \psi_n^{(0)} \rangle e^{i\omega_{kn}t} F^*(t') dt' \\ &= \langle \psi_n^{(0)} | \hat{B} | \psi_n^{(0)} \rangle + \int_{-\infty}^t \frac{i}{\hbar} \langle \psi_n^{(0)} | [\hat{B}(t), \hat{A}(t')] | \psi_n^{(0)} \rangle F(t') dt', \end{aligned}$$

onde $\hat{B}(t) = e^{-\frac{t}{\hbar}\hat{H}_S} \hat{B} e^{\frac{t}{\hbar}\hat{H}_S}$ (representação de interação). Aqui consideramos, sem perda de generalidade, que o estado microscópico inicial do sistema é determinado por $|\psi_n^{(0)}\rangle$. Com o intuito de analisar o quanto o valor médio de $B(t)$ sob perturbação, $\langle B(t) \rangle$, desvia-se do seu valor de equilíbrio $\langle B(t) \rangle_0$ calculamos

$$\begin{aligned} \langle \Delta B(t) \rangle &\equiv \langle B \rangle - \langle B \rangle_0 = \int_{-\infty}^t \frac{i}{\hbar} \sum_n \varrho \langle \psi_n^{(0)} | [\hat{B}(t), \hat{A}(t')] | \psi_n^{(0)} \rangle F(t') dt' \\ &= \int_{-\infty}^t \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \left\{ \varrho [\hat{B}(t), \hat{A}(t')] \right\} F(t') dt' \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

$$\begin{aligned} &= \int_{-\infty}^t \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \left\{ \varrho e^{\frac{t}{\hbar}\hat{H}_S} \hat{B} e^{\frac{(t-t')}{\hbar}\hat{H}_S} \hat{A} e^{-\frac{t-t'}{\hbar}\hat{H}_S} \right\} F(t') dt' \\ &= \int_{-\infty}^t \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \left\{ e^{-\frac{t-t'}{\hbar}\hat{H}_S} \varrho e^{\frac{t-t'}{\hbar}\hat{H}_S} \hat{B} e^{-\frac{(t-t')}{\hbar}\hat{H}_S} \hat{A} \right\} F(t') dt' \\ &= \int_{-\infty}^t \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \left\{ \varrho e^{\frac{(t-t')}{\hbar}\hat{H}_S} \hat{B} e^{-\frac{(t-t')}{\hbar}\hat{H}_S} \hat{A} \right\} F(t') dt' \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

$$= \int_{-\infty}^t \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \left\{ \varrho \hat{B}(t-t') \hat{A}(0) \right\} F(t') dt'$$

onde ϱ é o operador estatístico de equilíbrio. Note que a quantidade $\text{Tr} \left\{ \varrho [\hat{B}(t), \hat{A}(t')] \right\}$ depende apenas da diferença entre t e t' , fato que se deve à propriedade cíclica do traço e de ϱ comutar com \hat{H}_0 . Portanto, se definirmos a susceptibilidade generalizada pela expressão

$$\langle \Delta B(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \chi_{BA}(t-t') F(t') dt', \quad (\text{A.4})$$

ou, de forma equivalente, pelo produto das respectivas transformadas de Fourier,

$$\langle \Delta B(\omega) \rangle = \chi_{BA}(\omega) F(\omega), \quad (\text{A.5})$$

onde

$$\chi_{BA}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi_{BA}(t') e^{-i\omega t'} dt'.$$

Comparando as eqs. A.2 e A.4 percebemos que

$$\int_{-\infty}^t \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \left\{ \varrho [\hat{B}(t), \hat{A}(t')] \right\} F(t') dt' = \int_{-\infty}^{\infty} \Theta(t-t') \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \left\{ \varrho [\hat{B}(t), \hat{A}(t')] \right\} F(t') dt' = \int_{-\infty}^{\infty} \chi_{BA}(t-t') F(t') dt'.$$

Logo, a susceptibilidade dinâmica do meio pode ser escrita como

$$\chi_{BA}(t-t') = \Theta(t-t') \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \left\{ \varrho [\hat{B}(t), \hat{A}(t')] \right\} = \Theta(t-t') \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \left\{ \varrho [\Delta \hat{B}(t), \Delta \hat{A}(t')] \right\},$$

sendo $\Theta(t-t')$ a função degrau de Heaviside. Por outro lado, a transformada de Fourier de $\chi_{BA}(t-t')$ é dada por

$$\begin{aligned} \chi_{BA}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} \chi_{BA}(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Theta(\tau) \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \left\{ \varrho [\Delta \hat{B}(\tau), \Delta \hat{A}(0)] \right\} e^{i\omega\tau} d\tau \\ &= \int_0^{\infty} \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \left\{ \varrho [\Delta \hat{B}(\tau), \Delta \hat{A}(0)] \right\} e^{i\omega\tau} d\tau. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

É importante salientar que o índice BA explicita que a resposta à perturbação é observada através da variável B e que a força externa F se acopla à variável A . A expressão (A.6) sintetiza de forma

generalizada o TFD, relacionando a suscetibilidade complexa com a correlação temporal. Usualmente, no entanto, o TFD é associado à parte *dissipativa* de $\chi_{BA}(\omega)$, que basicamente depende de

$$\omega \{ \chi_{BA}(\omega) - \chi_{BA}(-\omega) \}$$

Explicitando as partes real e imaginária pura da susceptibilidade dinâmica, podemos escrever $\chi_{BA}(\omega) = \chi'_{BA}(\omega) + i\chi''_{BA}(\omega)$ e, assim, é possível ver que se $\chi''_{BA}(-\tau) = -\chi''_{BA}(\tau)$, então $\chi''_{BA}(-\omega) = -\chi''_{BA}(\omega)$ e a dissipação está associada à $\chi''_{BA}(\omega)$; se, por outro lado, $\chi''_{BA}(-\tau) = \chi''_{BA}(\tau)$, então $\chi''_{BA}(-\omega) = \chi''_{BA}(\omega)$, e a dissipação se associa à $\chi'_{BA}(\omega)$. O comportamento de $\chi''_{BA}(\tau)$ com relação a inversão temporal é, por sua vez, definido pelo comportamento das variáveis \hat{A} e \hat{B} . Assim, podemos resumir a dependência da seguinte maneira: se \hat{A} e \hat{B} têm a mesma mudança de sinal sob inversão temporal (o que geralmente ocorre), $\omega\chi''_{BA}(\omega)$ é a parte dissipativa da suscetibilidade; alternativamente, se \hat{A} e \hat{B} têm mudanças de sinal distintas sob inversão temporal (como ocorre com os pares posição e momento, campos elétricos e magnéticos, etc.), $\omega\chi'_{BA}(\omega)$ é a parte dissipativa.

Podemos, finalmente, relacionar a parte dissipativa da suscetibilidade com a correlação temporal entre as variáveis \hat{A} e \hat{B} do sistema, definida por

$$S_{BA}(t, t') \equiv \text{Tr} \{ \varrho \Delta \hat{B}(t) \Delta \hat{A}(t') \},$$

que, como visto anteriormente, é invariante por translação temporal, $S_{BA}(t, t') = S_{BA}(t - t')$. Consideremos inicialmente uma situação em que \hat{A} e \hat{B} obedecem à mesma simetria temporal. Assim, a dissipação do sistema depende de $\chi''_{BA}(\omega)$ e pode ser calculada da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} 2i\chi''_{BA}(\omega) &= \chi_{BA}(\omega) - \chi_{BA}(-\omega) \\ &= \int_0^\infty \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \{ \varrho [\Delta \hat{B}(\tau), \Delta \hat{A}(0)] \} e^{i\omega\tau} d\tau - \int_0^\infty \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \{ \varrho [\Delta \hat{B}(\tau), \Delta \hat{A}(0)] \} e^{-i\omega\tau} d\tau. \end{aligned}$$

Neste caso, como $\chi''_{BA}(-\tau) = -\chi''_{BA}(\tau)$ percebemos que

$$2i\chi''_{BA}(\omega) = \int_{-\infty}^\infty \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \{ \varrho [\Delta \hat{B}(\tau), \Delta \hat{A}(0)] \} e^{i\omega\tau} d\tau.$$

Pode-se, no entanto, escrever $\text{Tr} \{ \varrho [\Delta \hat{B}(\tau), \Delta \hat{A}(0)] \}$ em termos da correlação $S_{BA}(\tau)$,

$$\text{Tr} \{ \varrho [\Delta \hat{B}(\tau), \Delta \hat{A}(0)] \} = \text{Tr} \{ \varrho \hat{B}(\tau) \hat{A}(0) \} - \text{Tr} \{ \varrho \hat{A}(0) \hat{B}(\tau) \} = S_{BA}(\tau) - S_{AB}(-\tau).$$

Mas

$$S_{AB}(-\tau) = \text{Tr} \{ \varrho \hat{A}(0) \hat{B}(\tau) \} = \text{Tr} \{ \hat{A}(i\hbar\beta) \varrho \hat{B}(\tau) \} = \text{Tr} \{ \varrho \hat{B}(\tau) \hat{A}(i\hbar\beta) \} = \text{Tr} \{ \varrho \hat{B}(\tau - i\hbar\beta) \hat{A}(0) \},$$

sendo que utilizamos, nas três últimas igualdades, o cálculo da comutação² de ϱ e $\hat{A}(0)$, a propriedade cíclica do traço e a invariância do traço por translação temporal. Podemos, portanto escrever

$$\begin{aligned} 2\hbar\chi''_{BA}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} \{ S_{BA}(\tau) - S_{BA}(\tau - i\hbar\beta) \} e^{i\omega\tau} d\tau = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(1 - e^{i\hbar\beta \frac{\partial}{\partial \tau}} \right) S_{BA}(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau = \\ &= \left(1 - e^{\hbar\omega\beta} \right) S_{BA}(\omega), \end{aligned} \tag{A.7}$$

como é usualmente enunciado o TFD. No limite clássico, onde \hbar é desprezível encontramos

$$\chi''_{BA}(\omega) = \frac{\omega\beta}{2} S_{BA}(\omega).$$

²Dada a representação de interação, $e^{-\beta\hat{H}_S} \hat{A}(t') = e^{-\beta\hat{H}_S} e^{\frac{t'}{\hbar}\hat{H}_S} \hat{A} e^{-\frac{t'}{\hbar}\hat{H}_S} = e^{-\frac{(t'+i\hbar\beta)}{\hbar}\hat{H}_S} \hat{A} e^{\frac{(t'+i\hbar\beta)}{\hbar}\hat{H}_S} e^{-\beta\hat{H}_S} = \hat{A}(t' + i\hbar\beta) e^{-\beta\hat{H}_S}$.

Apêndice B

Cálculo da integral

Neste apêndice, utilizaremos a regra de Leibniz para calcular a integral

$$\int_0^t q(s)(t-s) \frac{d}{dt} \left[\frac{d}{ds} \delta(t-s) \right] ds. \quad (\text{B.1})$$

Solução:

Note que

$$\frac{d}{dt} \left[(t-s) \frac{d}{ds} \delta(t-s) \right] = -\frac{d}{ds} \delta(t-s) + (t-s) \frac{d^2}{dt ds} \delta(t-s)$$

então

$$(t-s) \frac{d^2}{dt ds} \delta(t-s) = \frac{d}{dt} \left[(t-s) \frac{d}{ds} \delta(t-s) \right] - \frac{d}{ds} \delta(t-s).$$

Daí

$$\begin{aligned} \int_0^t q(s)(t-s) \frac{d^2}{dt ds} \delta(t-s) ds &= \int_0^t q(s) \left[\frac{d}{dt} \left[(t-s) \frac{d}{ds} \delta(t-s) \right] - \frac{d}{ds} \delta(t-s) \right] ds \\ &= \int_0^t q(s) \frac{d}{dt} \left[(t-s) \frac{d}{ds} \delta(t-s) \right] ds + \frac{1}{2} \dot{q}(t). \end{aligned}$$

A regra de Leibniz diz:

$$\frac{d}{dt} \int_{g(t)}^{h(t)} f(s, t) ds = \int_{g(t)}^{h(t)} \frac{\partial}{\partial t} f(s, t) ds + f(g(t), t) \frac{dg}{dt} - f(h(t), t) \frac{dh}{dt}.$$

No nosso caso, identificamos

$$\begin{aligned} f(t, s) &= q(s)(t-s)\frac{d\delta(t-s)}{ds}, \\ h(t) &= t \\ g(t) &= 0 \end{aligned}$$

Imediatamente podemos ver que

$$f(h(t), t)\frac{\partial g}{\partial t} = 0.$$

Por outro lado, pelo teorema fundamental do cálculo,

$$f(t, g(t))\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{d}{dt} \int_0^t f(s, 0)\frac{d}{ds}h(s)ds,$$

logo,

$$\begin{aligned} f(g(t), t)\frac{\partial h}{\partial t} &= \frac{d}{dt} \int_0^t f(s, 0)\frac{d}{ds}h(s)ds \\ &= \frac{d}{dt} \int_0^t \left[(s-0)q(0)\frac{d}{ds}\delta(s) \right] ds \\ &= \frac{d}{dt} \int_0^t sq(0)\frac{d\delta(s)}{ds}ds \\ &= \frac{d}{dt} \int_0^t [-q(0)]\delta(s)ds \\ &= -\frac{d}{dt}[q(0)] = 0. \end{aligned}$$

Assim,

$$\begin{aligned} \int_0^t \frac{d}{dt} \left[q(s)(s-t)\frac{d}{ds}\delta(s-t) \right] ds &= \frac{d}{dt} \int_0^t q(s)(t-s)\frac{d}{ds}\delta(t-s)ds \\ &= \frac{d}{dt} [-(t-s)\dot{q}(s) + q(s)]_{s=t} \\ &= +\frac{1}{2}\dot{q}(t). \end{aligned}$$

Portanto a integral (B.1) pode ser escrita como

$$\int_0^t q(s)(t-s)\frac{d}{dt} \left[\frac{d}{ds}\delta(t-s) \right] ds = \frac{1}{2}\dot{q}(t) + \frac{1}{2}\dot{q}(t) = \dot{q}(t)$$

Apêndice C

O Potencial Carmônico

Este apêndice descreve algumas das propriedades do potencial, proposto por Bonança e Aguiar, cujo nome é originário da junção das palavras “caótico” e “harmônico”, descrito pela Hamiltoniana

$$H = \frac{P_x^2 + P_y^2}{2} + \frac{\beta}{2}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2) + \frac{(1 - \beta)}{2} x^2 y^2, \quad (\text{C.1})$$

onde β é o parâmetro que controla a caoticidade do sistema. Note que, para $0 < \beta < 1$, à medida que β diminui, o termo $x^2 y^2$ é cada vez mais relevante para a dinâmica do sistema. Portanto, a constante β desempenha o mesmo papel que constante a no Potencial Quártico. Dizemos que a caoticidade do sistema Carmônico aumenta quando diminuimos o valor de β . Por outro lado, quando $\beta = 1$, o Hamiltoniano fica

$$H = \frac{P_x^2 + P_y^2}{2} + \frac{1}{2}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2),$$

que nada mais é do que o Hamiltoniano de uma dupla de osciladores harmônicos.

O sistema Carmônico é reescalável com a energia desde que as frequências também sejam reescaladas. De fato, supondo

$$H(x_0, y_0, P_{x_0}, P_{y_0}, \omega_{x_0}, \omega_{y_0}) = E_0,$$

e dado

$$H(x, y, P_x, P_y, \omega_x, \omega_y) = E \neq E_0,$$

se tomarmos

$$\begin{aligned} P_x &= \gamma P_{x_0}, & x &= \alpha x_0, & \omega_x &= \mu \omega_{x_0} \\ P_y &= \gamma P_{y_0}, & y &= \alpha y_0, & \omega_y &= \mu \omega_{y_0}, \end{aligned}$$

onde γ , α e μ são constantes de reescala, temos

$$\gamma^2 \left(\frac{P_x^2 + P_y^2}{2} \right) + \alpha^2 \mu^2 \frac{\beta}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2) + \alpha^4 \frac{(1-\beta)}{2} x^2 y^2 = E.$$

Se tomarmos $\alpha^2 = \mu^2$ e $\alpha^4 = \gamma^2 = \Omega$ encontramos,

$$H(x, y, P_x, P_y, \omega_x, \omega_y) = \Omega E_0 \implies \Omega = \frac{E}{E_0}.$$

Daí,

$$\gamma = \left(\frac{E}{E_0} \right)^{\frac{1}{2}}$$

e

$$\alpha = \left(\frac{E}{E_0} \right)^{\frac{1}{4}} = \mu.$$

Assim,

$$\begin{aligned} P_x(t') &= \left(\frac{E}{E_0} \right)^{\frac{1}{2}} P_{x_0}(t), & x(t') &= \left(\frac{E}{E_0} \right)^{\frac{1}{4}} x_0(t), & \omega_x &= \left(\frac{E}{E_0} \right)^{\frac{1}{4}} \omega_{x_0} \\ P_y(t') &= \left(\frac{E}{E_0} \right)^{\frac{1}{2}} P_{y_0}(t), & y(t') &= \left(\frac{E}{E_0} \right)^{\frac{1}{4}} y_0(t), & \omega_y &= \left(\frac{E}{E_0} \right)^{\frac{1}{4}} \omega_{y_0}. \end{aligned}$$

Substituindo a expressão para a transformação $P_x(t')$ na equação de Hamilton obtemos

$$\dot{x}(t') = \frac{d}{dt'} \left[\left(\frac{E}{E_0} \right)^{\frac{1}{4}} x_0(t) \right] = P_x(t') = \left(\frac{E}{E_0} \right)^{\frac{1}{2}} P_{x_0}(t),$$

o que implica em

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt'} x_0(t) &= \left(\frac{E}{E_0} \right)^{\frac{1}{4}} P_{x_0}(t) \\ \frac{dx_0(t)}{dt} \frac{dt}{dt'} &= \dot{x}_0(t) \frac{dt}{dt'} = \left(\frac{E}{E_0} \right)^{\frac{1}{4}} P_{x_0}(t). \end{aligned}$$

Como $\dot{x}_0(t) = P_{x_0}(t)$ então

$$\frac{dt}{dt'} = \left(\frac{E}{E_0} \right)^{\frac{1}{4}},$$

o que resulta em

$$t' = \left(\frac{E}{E_0} \right)^{-\frac{1}{4}} t.$$

Resumindo:

$$P_{x,y}(t') = \left(\frac{E}{E_0}\right)^{\frac{1}{2}} P_{x_0,y_0}(t) \quad (\text{C.2})$$

$$\begin{Bmatrix} x \\ y \end{Bmatrix} (t') = \left(\frac{E}{E_0}\right)^{\frac{1}{4}} \begin{Bmatrix} x_0 \\ y_0 \end{Bmatrix} (t) \quad (\text{C.3})$$

$$\omega_{x,y} = \left(\frac{E}{E_0}\right)^{\frac{1}{4}} \omega_{x_0,y_0} \quad (\text{C.4})$$

$$t' = \left(\frac{E}{E_0}\right)^{-\frac{1}{4}} t. \quad (\text{C.5})$$

Assim, a dinâmica do sistema Carmônico em quaisquer duas superfícies de energia serão equivalentes por meio da reescala das coordenadas generalizadas, do tempo e de suas frequências.

C.1 O banho de Sistemas Carmônicos

A ideia aqui, é estudar um sistema análogo ao problema central desta tese (eq. (2.28)) onde o banho é formado por um conjunto finito de sistemas carmônicos por meio da Hamiltoniana

$$H = H_O + H_C + \frac{\lambda}{\sqrt{N}} H_I \quad (\text{C.6})$$

onde,

$$H_O = \frac{p^2}{2} + \frac{\omega^2 q^2}{2}, \quad (\text{C.7})$$

$$H_C = \sum_{n=1}^N \left[\frac{P_{x_n}^2 + P_{y_n}^2}{2} + \frac{\beta}{2} (\omega_{x_n}^2 x_n^2 + \omega_{y_n}^2 y_n^2) + \frac{(1-\beta)}{2} x_n^2 y_n^2 \right], \quad (\text{C.8})$$

$$V_I = \sum_{n=1}^N q x_n. \quad (\text{C.9})$$

Note que para $\beta \neq 1$, o banho é composto por N sistemas não lineares, enquanto que para $\beta = 1$, o banho é formado por N osciladores harmônicos acoplados ao sistema de interesse. Com esta Hamiltoniana, futuramente, poderemos estudar os efeitos da transição do regime harmônico para o caótico, possibilitando uma comparação direta com o modelo Caldeira-Leggett [12] e recentes resultados obtidos por Manchein, Rosa e Beims [13, 14]. Além disso, gostaríamos de mostrar que os resultados sobre a dissipação efetiva, obtidos nesta tese, para um banho composto por N sistemas quárticos (eq. (3.2)), não é um fenômeno associado exclusivamente ao SQ e, sim, um fenômeno geral relacionado

à presença de caos. Para que possamos estudar numericamente, a dinâmica do sistema completo de forma equivalente ao que fizemos no Capítulo 3, necessitamos distribuir aleatoriamente as condições iniciais dentro da superfície de energia de cada membro do banho. Construiremos na próxima seção, uma parametrização para o sistema Carmônico baseada na parametrização do quártico, descrita pelas equações (3.10) a (3.13).

C.1.1 Parametrização para o Potencial Carmônico

Reescrevendo o Hamiltoniano (C.1) como

$$\begin{aligned} H &= \frac{p_x^2 + p_y^2}{2} + \alpha x^2 + \eta y^2 + \gamma x^2 y^2 \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} p_x & p_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \alpha & \eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x^2 & y^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \gamma/2 \\ \gamma/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

onde $\alpha = \frac{\beta\omega_x^2}{2}$, $\eta = \frac{\beta\omega_y^2}{2}$ e $\gamma = \frac{1-\beta}{2}$. Definindo $v = \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \end{pmatrix}$, $u = \begin{pmatrix} \alpha \\ \eta \end{pmatrix}$ e $A = \begin{pmatrix} 0 & \gamma/2 \\ \gamma/2 & 0 \end{pmatrix}$, queremos encontrar uma transformação que nos permita escrever

$$u^t v + v^t A v = V^t A V + \delta, \quad \delta \in \mathbb{R}, \quad (\text{C.10})$$

com $V = v + v_0$. Substituindo $V = v + v_0$ em (C.10) temos

$$u^t v + v^t A v = (v + v_0)^t A (v + v_0) + \delta = v^t A v + v^t A v_0 + v_0^t A v + v_0^t A v_0 + \delta$$

o que implica em

$$u^t v = 2v_0^t A v + v_0^t A v_0 + \delta,$$

logo

$$u^t v = 2v_0^t A v$$

e

$$v_0^t A v_0 + \delta = 0,$$

ou seja,

$$v_0 = \frac{A^{-1}u}{2}$$

e

$$\delta = -v_0^t A v_0 = \left(\frac{A^{-1}u}{2}\right)^t A \left(\frac{A^{-1}u}{2}\right) = -\frac{u^t A^{-1}u}{4},$$

com

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 2/\gamma \\ 2/\gamma & 0 \end{pmatrix}.$$

Efetuando os cálculos obtemos,

$$v_0 = \frac{1}{\gamma} \begin{pmatrix} \eta \\ \alpha \end{pmatrix}$$

e

$$\delta = -\frac{\beta^2 \omega_x^2 \omega_y^2}{2(1-\beta)}.$$

Desta maneira, encontramos uma transformação $V(v) = v + v_0$ tal que o Hamiltoniano original (C.1) pode ser reescrito como

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2} + V^t A V + \delta.$$

Se escrevermos

$$V = \begin{pmatrix} X^2 \\ Y^2 \end{pmatrix}$$

então

$$\begin{aligned} H &= \frac{p_x^2 + p_y^2}{2} + \gamma X^2 Y^2 + \delta \\ &= \frac{p_x^2 + p_y^2}{2} + \frac{(1-\beta)}{2} X^2 Y^2 - \frac{\beta^2 \omega_x^2 \omega_y^2}{2(1-\beta)}. \end{aligned}$$

Portanto, se olharmos para a parametrização do sistema quártico (equações (3.10) a (3.13)), veremos que se tomarmos $a = 0$ obteremos uma parametrização para o Hamiltoniano

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2} + x^2 y^2.$$

Desta maneira, se o Hamiltoniano fosse

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2} + \gamma X^2 Y^2,$$

a parametrização seria

$$\begin{aligned} X^2 &= \sqrt{\frac{H_c}{\gamma \cos 2\theta}} [\cos \theta + \sin \theta] \sin \xi \\ Y^2 &= \sqrt{\frac{H_c}{\gamma \cos 2\theta}} [\cos \theta - \sin \theta] \sin \xi \\ p_x &= \sqrt{2H_c} \cos \varphi \cos \xi \\ p_y &= \sqrt{2H_c} \sin \varphi \cos \xi, \end{aligned}$$

Além disso, como $V = v + v_0$ temos

$$\begin{aligned} X^2 &= x^2 + \eta/\gamma \implies x^2 = X^2 - \eta/\gamma \\ Y^2 &= y^2 + \alpha/\gamma \implies y^2 = Y^2 - \alpha/\gamma, \end{aligned}$$

logo a parametrização para o Hamiltoniano original (C.1), a menos de uma constante, será dada por

$$x^2 = \sqrt{\frac{H_c}{\gamma \cos 2\theta}} [\cos \theta + \sin \theta] \sin \xi - \frac{\beta \omega_x^2}{1 - \beta} \quad (\text{C.11})$$

$$y^2 = \sqrt{\frac{H_c}{\gamma \cos 2\theta}} [\cos \theta - \sin \theta] \sin \xi - \frac{\beta \omega_y^2}{1 - \beta} \quad (\text{C.12})$$

$$p_x = \sqrt{2H_c} \cos \varphi \cos \xi \quad (\text{C.13})$$

$$p_y = \sqrt{2H_c} \sin \varphi \cos \xi. \quad (\text{C.14})$$

De fato, podemos mostrar que a substituição das equações acima em (C.1) nos conduz a

$$H = H_C + \delta.$$

Isto significa que a parametrização (C.14), acima, apenas altera pela constante δ , o valor da energia para o sistema caótico. Obviamente, as equações de movimento não são alteradas.

C.2 Dissipação efetiva utilizando o Potencial Carmônico

Utilizando a parametrização (C.11) a (C.14) somos capazes de distribuir aleatoriamente as condições iniciais para cada um dos elementos do banho (eq. (C.8)), assim como fizemos na seção

3.3.1. Neste novo modelo, temos um ingrediente a mais, os pares de frequência $(\omega_{xn}, \omega_{yn})$. Assim como é feito no modelo Caldeira-Leggett, as frequências são distribuídas de acordo com a distribuição de probabilidade linear, $p(\omega) = \eta\omega$. A figura C.1 nos mostra o comportamento da energia do sistema central (OH), quando acoplado por meio da Hamiltoniana (C.6), com os seguintes parâmetros iniciais

- $E_o = 10.0$ (energia inicial do OH);
- $\omega_o = 0.3$ (frequência natural do OH);
- $\lambda = 0.01$ (constante de acoplamento);
- $N = 100$ (número de sistemas no banho).

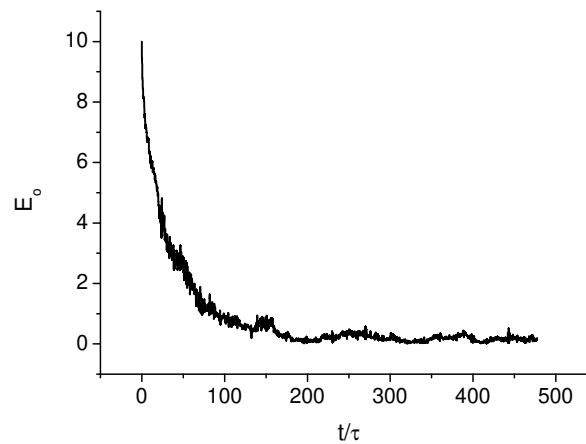


Figura C.1: Curva de dissipação para um oscilador harmônico sujeito à ação de um banho de $N = 100$ sistemas harmônicos no regime não linear.

Como podemos ver, a dissipação efetiva por meio do acoplamento com um banho finito com dinâmica não linear, não é um fenômeno exclusivo do banho de quárticos (como vimos no Capítulo 3). O resultado acima, na verdade, dá mostras de que este é um fenômeno, aparentemente, universal.

Referências Bibliográficas

- [1] K. Ikeda, *Annals of Physics* **227**, 1 (1993).
- [2] Y. Kondoh and J. W. Van Dam, *Phys. Rev. E* **52**, 1721 (1995).
- [3] R. Brown, *Philosophical Magazine N.S.* **4**, 161 (1828).
- [4] M. Arndt, O. Nairz, J. Vos-Andreae, C. Keller, van der Zouw G., and A. Zeilinger, *Nature* **401**, 680 (1999).
- [5] R. P. Feynman and F. L. Vernon, *Ann. Phys.* **24**, 118 (1963).
- [6] M. V. S. Bonanca and M. A. M. de Aguiar, *Physica A* **365**, 333 (2006).
- [7] A. Einstein, *Ann. der Phys.* **17**, 549 (1905).
- [8] A. Einstein, *Investigations on the Theory of Brownian Movement* (Methuen and Co. Ltd, London, 1926).
- [9] M. J. Perrin, *Brownian Movement and Molecular Reality* (Taylor and Francis,, London, 1910).
- [10] P. Langevin, *C.R. Acad. Sci.(Paris)* **146**, 530 (1908).
- [11] L. E. Rachel, *A Modern Course in Statistical Physics* (Wiley-VCH,, Weinhem, 2009).
- [12] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, *Physica(Amsterdam)* **121A**, 587 (1983).
- [13] C. Manchein, J. Rosa, and M. W. Beims, *Physica D* **238**, 1688 (2009).
- [14] J. Rosa and M. W. Beims, *Phys. Rev. E* **78**, 031126 (2008).
- [15] M. Wilkinson, *J.Phys. A: Math. Gen.* **23**, 3603 (1990).
- [16] M. V. Berry and J. M. Robbins, *Proc. R. Soc. London A* **442**, 659 (1993).

- [17] E. Ott, Phys. Rev. Lett. **42**, 1628 (1979).
- [18] R. Brown, E. Ott, and C. Grebogi, Phys. Rev. Lett. **59**, 1173 (1987).
- [19] R. Brown, E. Ott, and C. Grebogi, J. Stat. Phys. **49**, 511 (1987).
- [20] C. Jarzynski, Phys. Rev. Lett. **74**, 2937 (1995).
- [21] T. O. de Carvalho and M. A. M. de Aguiar, Phys. Rev. Lett. **76**, 2690 (1996).
- [22] D. Cohen, Phys. Rev. Lett. **78**, 2878 (1997).
- [23] D. Cohen, Phys. Rev. Lett. **82**, 4951 (1999).
- [24] D. Cohen, Annals of Phys. **283**, 175 (2000).
- [25] D. Cohen and T. Kottos, Phys. Rev. E **69**, 055201 (2004).
- [26] O. M. Auslaender and S. Fishman, Phys. Rev. Lett. **84**, 1886 (2000).
- [27] R. A. Jalabert and H. M. Pastawski, Phys. Rev. Lett. **86**, 2490 (2001).
- [28] Z. P. Karkuszewski, C. Jarzynski, and W. H. Zurek, Phys. Rev. Lett. **89**, 170405 (2002).
- [29] G. Benenti and G. Casati, Phys. Rev. E **65**, 066205 (2002).
- [30] C. H. Chou, B. Hu, and T. Yu, Physica A **387**, 432 (2008).
- [31] A. Pereverzev, Y. V. Pereverzev, and O. V. Prehздо, J. Chem. Phys. **128**, 134107 (2008).
- [32] M. V. S. Bonanca and M. A. M. de Aguiar, Phys. Rev. A **74**, 012105 (2006).
- [33] A. B. Adib, J. Stat. Phys. **117**, 581 (2002).
- [34] M. Bianucci, R. Mannela, B. J. West, and P. Grigolini, Phys. Rev. E **51**, 3002 (1995).
- [35] R. Kubo, M. Toda, and N. Hashitsume, *Statistical Physics II, Nonequilibrium Statistical Mechanics* (Springer-Verlag, Heidelberg, 1985).
- [36] A. Carnegie and I. C. Percival, J. Phys. A: Math. Gen. **17**, 801 (1983).
- [37] P. Dahlqvist and G. Russberg, Phys. Rev. Lett. **65**, 2837 (1990).
- [38] M. Baranger and K. T. R. Davies, Annals of Physics **177**, 330 (1987).

- [39] F. A. Bajay, *Órbitas Periódicas em Sistemas Caóticos*, Tese de doutorado, Unicamp (1996).
- [40] M. V. S. Bonança, *Dissipação, Termalização e Descoerência via Acoplamento Caótico*, Tese de doutorado, Unicamp (2006).
- [41] M. P. Joy and M. Sabir, PRANAMA-Journal of Physics **40**, 17 (1993).
- [42] R. C. Tolman, Phys. Rev. **11**, 261 (1918).
- [43] V. S. Anishchenko and T. E. Vadivasova, Physica A **325**, 199 (2003).
- [44] M. A. Marchiori, R. Fariello, and M. A. M. de Aguiar, Em preparação.
- [45] H. Nyquist, Phys. Rev. **32**, 97 (1928).
- [46] H. B. Callen and T. A. Welton, Phys. Rev. **83**, 34 (1951).
- [47] R. Kubo, Rep; Prog. Phys. **29**, 255 (1966).