

Contribuições à Mecânica Estatística de sistemas com interação de longo alcance

Msc. José Roberto Steiner de Moura

Orientador: Prof. Dr. Tarcísio Marciano da Rocha-Filho

Coorientador: Ademir E. de Santana

Instituto de Física - Universidade de Brasília

Sumário

Sumário	2
1 Introdução	8
2 Sistemas Com Interações de Longo Alcance	11
2.1 Características Gerais de Sistemas com Interações de Longo Alcance	11
2.2 Sistema Autogravitante	14
3 Teoria Cinética	17
3.1 O Espaço de Fase	17
3.2 Equação de Liouville	19
4 Teoria Perturbativa: Dinâmica de Correlações	21
4.1 Expansão da Equação de Liouville	21
4.2 Solução da Equação de Liouville	27
4.3 Diagramas	33
5 Equação de Vlasov para Sistemas Autogravitante	44
5.1 Hierarquia BBGKY para Partículas autogravitantes Não-Idênticas	44
5.2 Equação Cinética para Escalas de Tempo Curtas	46
6 Validade da Equação de Vlasov para N Finito - Aplicação a Sistemas Unidimensionais	50
6.1 Modelo do Anel autogravitante	51
6.2 Modelo HMF	54

<i>SUMÁRIO</i>	3
6.3 Folhas autogravitantes	64
7 Segregação de Massas	70
7.1 Hamiltonian Mean Field	71
8 Conclusões e Perspectivas	76
8.1 Perspectivas	79
A Hierarquia BBGKY	81
B Métodos Numéricos	84
B.1 Dinâmica Molecular	84
B.2 Solução Numérica da Equação de Vlasov	88
Referências Bibliográficas	89

*Dedico esta tese à Letícia, minha fada que vem iluminando
a minha vida.*

Agradecimentos

Acima de todos agradeço à Deus que sempre me guiou ao longo da minha vida.

Aos meus pais, Rose e Roberto, por terem me apoiado sempre e nunca duvidarem de mim. Aos meus irmãos, Camillo e Arthur. Aos meus sobrinhos, Belinha, Tutucão e Camillinho, a nova geração da família. As minhas cunhadas Marisa e Carol, as quais entraram para essa família com todo o amor e carinho possíveis.

Ao meu orientador, Tarcísio Marciano, por todo o tempo e paciência gastos comigo ao longo desses anos. Ao Prof. Ademir Santana por toda discussão, tanto em física, quanto em qualquer outro assunto. Ao professor Marco Amato, por várias lições de vida que tive ao longo de nossas conversas. Aos Profs. Annibal, Antony e Amilcar por toda a ajuda prestada.

Aos amigos Cinthia, Chris, Marcelo, Fábio, Paulo, Regina, André, Regina, Márcio e Marcela por todo tempo gasto ouvindo minhas constantes reclamações.

Um agradecimento especial ao Prof. Zolacir, que mesmo tendo conhecido a pouco tempo se tornou um amigo inestimável e muito me orientou em certas decisões tomadas, tanto sobre a vida quanto a uma boa bebida.

Agradeço o apoio financeiro da CAPES.

Resumo

A evolução temporal da função distribuição para a uma partícula em um sistema Hamiltoniano com interação de longo alcance, ou seja, sistemas em que o potencial de interação variam com $r^{-\alpha}$ com $\alpha < d$, onde d é a dimensão do espaço, é regida pela Vlasov no limite em que $N \rightarrow \infty$. Exemplos desses sistemas são sistemas autogravitantes, plasmas carregados e uma série de modelos derivados destes. O objetivo dessa tese é apresentar uma derivação dessa equação utilizando a técnica desenvolvida na escola de Bruxelas nos anos 1950 à 1970, fazendo uma discussão da correlação entre as partículas do sistema, o que nos permite uma melhor compreensão de sue papel no estudo dos estados quase-estacionários. A vantagem dessa metodologia é que ela permite estimar explicitamente a ordem de magnitude das correlações entre partículas. Uma vez estabelecida a equação de Vlasov, realizamos uma série de simulações de dinâmica molecular assim como a solução numérica da equação de Vlasov, e mostramos como elas convergem. Para a realização de tais simulações utilizamos três sistemas, modelo *Hamiltonian Mean Field*, o modelo do anel autogravitante e o modelo de folhas autogravitantes .

Abstract

The temporal evolution of the one-particle distribution function of a Hamiltonian system with long-range interaction, i.e, systems with an interaction potential behaving at long distances as $r^{-\alpha}$ with $\alpha < d$, where d is the spatial dimension, is governed by Vlasov equation in the limit as $N \rightarrow \infty$. Examples of such systems are self-gravitating systems, non-neutral plasmas and models derived from these. The objective of this thesis is to present a derivation of this equation using a technique developed by the Brussels school in the 1950's to the 1970's. We present a discussion of the role of inter-particle correlations and its role on the understanding of quasi-stationary states. The advantage of this methodology is that it allows an explicit estimate the order of magnitude of the correlations between particles. We also perform a series of molecular dynamics simulations and numerical solution of the Vlasov equation, showing how both converge for three simplified models: Hamiltonian Mean Field model, self-gravitating and the self-gravitating sheet model.

Capítulo 1

Introdução

Interações de longo alcance ocorrem em uma grande variedade de sistemas físicos, sendo, talvez, os mais comuns (não mais simples) os sistemas com interação gravitacional e coulombiana. Nos últimos anos, o desenvolvimento computacional permitiu que cada vez mais tais sistemas destes tipos fossem estudados, utilizando simulações numéricas com um número cada vez maior de partículas. Dessa forma foi possível avanços em problemas como a relaxação violenta, dinâmica de formação de galáxias, segregação de massas, evolução dos estados quasi-estacionários. Ainda assim, tais problemas continuam em aberto e com muito o que ser feito.

Um caso comum na natureza é o potencial proporcional a $1/r$, que descreve tanto partículas carregadas, quanto autogravitantes. No caso da interação Coulombiana, o potencial $\Phi(\mathbf{r})$ é dado pela solução da equação de Poisson

$$\nabla^2\Phi(\mathbf{r}) = -\rho,$$

onde ρ é a densidade da Carga. A equação de Poisson também é utilizada para descrever modelos de interação gravitacional, em que, para uma dada densidade de partículas ρ , o potencial gravitacional $\Phi_g(\mathbf{r})$ entre as partículas será dado pela solução da equação de Poisson

$$\nabla^2\Phi_g(\mathbf{r}) = \rho.$$

A dependência do potencial com a distância r em ambos os casos depende da dimensão do espaço. Para ilustrar o tipo de dificuldade encontrada

no estudo desses sistemas citamos o fato de que o tempo necessário para para que uma galáxia atinja o equilíbrio termodinâmico (tempo de relaxação) é da ordem do tempo de vida do próprio Universo [15]. Dada a complexidade desses sistemas, freqüentemente são estudados modelos mais simples que os reais, chamados *toy models*, que retêm importantes características da física desses sistemas, dentre os quais, podemos citar em especial o Modelo do Anel autogravitante (MAAG) [2, 3], *Hamiltonian Mean Field* [1] (HMF), o modelo de folhas autogravitantes em 1D [4, 5]. Outros modelos de interesse são estudados nas referências [29, 30, 28]. O modelo HMF é obtido ao retermos o primeiro termo da expansão em série de Fourier do potencial gravitacional em um modelo unidimensional. Será mostrado mais adiante, que o HMF é uma aproximação do MAAG quando fazemos o parâmetro de amortecimento ϵ ir para o infinito, $\epsilon \rightarrow \infty$. Para plasmas, o modelo em 1D, formado por planos paralelos, uniformemente carregados, tem sido estudado por Dawson [45]

As motivações que levaram a elaboração deste trabalho estão relacionadas com os avanços feitos, nas últimas duas décadas, na área de sistemas com interações de longo alcance. A possibilidade de poder entender a relaxação violenta [13], a descrição do sistema gravitacional por meio da Mecânica Estatística [14], uma teoria cinética mais abrangente [16, 17, 18, 19, 20, 21].

Esta tese é organizada na seguinte forma: no Capítulo 02 apresentamos introduzimos os sistemas com interação de longo alcance, bem como suas propriedades, além de uma descrição, via potencial, do sistema autogravitante. Já no Capítulo 03 fazemos uma revisão da Teoria Cinética, definindo o espaço de fase, trajetória no mesmo e os estágios de evolução de um sistema dinâmico. Ainda no mesmo capítulo deduzimos a equação de Liouville e escrevemos a hierarquia BBGKY. A partir do Capítulo 04 começamos a discutir as ferramentas que serão utilizadas para a dedução da equação cinética desejada tais como a expansão da equação de Liouville em uma série de potência para então estabelecermos uma teoria que nos permita utilizar os diagramas para a dedução da equação de Vlasov. Começamos o Capítulo 05 deduzindo uma hierarquia BBGKY para um sistema de partículas não-identicas. Isso feito utilizamos a teoria desenvolvida no capítulo anterior

para a dedução da equação de Vlasov para sistemas autogravitantes. No Capítulo 06 realizamos uma série de simulações numéricas que comprovam o resultado obtido no capítulo anterior. O Capítulo 07 trata do problema de segregação de massas a partir do modelo HMF. Por fim apresentamos nossas conclusões e perspectiva de trabalhos futuros.

Capítulo 2

Sistemas Com Interações de Longo Alcance

Neste capítulo serão apresentadas as principais propriedades termodinâmicas e estatísticas de sistemas com interações de longo alcance que os distinguem dos sistemas com interação de curto alcance. Serão apresentadas as descrições dos ensembles canônico e microcanônico de maneira a mostrar que podem ser inequivalentes. Além disso, por se tratarem de sistemas formados por um grande número de partículas, o tratamento estatístico é de grande relevância. Em sistemas com interação de curto alcance, as variáveis termodinâmicas, como a energia são extensivas. Será mostrado mais adiante que isto não ocorre para sistemas com interação de longo alcance. Por fim serão apresentados modelos simplificados, conhecidos como *toy models*, que são obtidas a partir dos sistemas autogravitante e coulombiano.

2.1 Características Gerais de Sistemas com Interações de Longo Alcance

Os sistemas com interação de longo alcance são caracterizados por um potencial que para longas distâncias decai com $r^{-\alpha}$, sendo r a distância entre as partículas e com $\alpha < d$, d sendo a dimensão do espaço. Tais sistemas possuem um grande apelo na Física, uma vez que muitos dos sistemas de reais

são desta categoria, a saber, plasmas, sistema autogravitante, fragmentação nuclear, fluidos em duas dimensões e condensados de Bose-Einstein. Uma das principais dificuldades apresentadas por sistemas desse tipo, é a não-aditividade da energia. De fato, se dividirmos o sistema em dois sub-sistemas disjuntos, a energia total inicial do sistema não será igual a soma das energias dos dois sub-sistemas, pois a energia potencial sobre qualquer uma das partículas será calculada sobre todas as demais partículas. Tal propriedade gera algumas conseqüências que vão de encontro com o que encontramos em sistemas com interações de curto alcance.

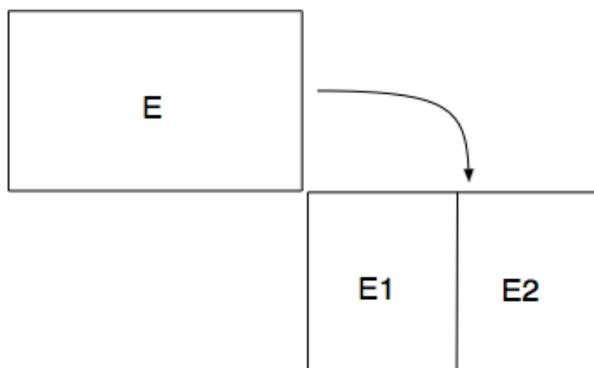


Figura 2.1: Não-aditividade de sistemas com interação de longo alcance.

Em sistemas com interação de curto alcance é bem entendido que os ensembles canônicos e microcanônico são equivalentes [22, 23]. As descrições do sistema feitas pelos dois ensembles não sendo equivalentes leva a uma série de conseqüências, entre elas uma concavidade negativa em parte da curva da entropia pela energia, o que resulta em uma capacidade térmica negativa. No ensemble canônico o calor específico é sempre positivo [23]. Uma variável termodinâmica, energia por exemplo, será extensiva se for proporcional ao número de elementos do sistema, e variáveis intensivas são mantidas constantes. Vamos considerar como exemplo a Hamiltoniana de Ising para spins globalmente acoplados:

$$H = -\frac{J}{N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2, \quad (2.1)$$

onde $S_i = \pm 1$, com $i = 1 \dots N$ e cada spin é afetado por todos os demais spins do sistema, e não apenas pelos primeiros vizinhos, enquanto J é o parâmetro de acoplamento, $J > 0$ corresponde ao sistema ferromagnético e $J < 0$ antiferromagnético, o fator $1/N$ é conhecido como prescrição de Kac [?], e corresponde a uma reescala apropriada no tempo, proporcional a N , que torna a Hamiltoniana extensiva. Mesmo que este procedimento torne a energia extensiva ela continua sendo não aditiva e a entropia não-extensiva [25, 26, 27].

Tome o sistema representado na Figura (2.1). Quando ele é separado em duas partes, onde o lado esquerdo é formado apenas por spins $+1$, enquanto o lado direito possui apenas spins -1 , pode-se calcular a energia de cada parte,

$$E_1 = E_2 = -\frac{J}{N} \left(\frac{N}{2} \right)^2.$$

A energia total do sistema, por sua vez é dada por

$$E = -\frac{J}{N} \left(\frac{N}{2} - \frac{N}{2} \right)^2 = 0$$

ou seja, o sistema é claramente não-aditivo, mesmo sendo extensivo. Neste caso, a energia da interface, normalmente negligenciada, é da mesma ordem que as energias de cada parte. Como o sistema é de longo alcance (o potencial não depende da distância entre as partículas), o sistema é tido como um modelo de campo médio [27].

Já sobre o calor específico negativo, considere a energia média de um sistema composto por diferentes níveis de energia E_i calculada no ensemble canônico,

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_i E_i e^{-\beta E_i}}{Z} = -\partial_\beta \ln Z,$$

onde Z é a função partição e $\partial_\beta = \frac{\partial}{\partial \beta}$. É direto mostrar que o calor específico:

$$C_v = \partial_T \langle E \rangle \propto \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle > 0, \quad (2.2)$$

ou seja, C_v é sempre positivo no ensemble canônico. Por outro lado, um sistema autogravitante tridimensional o teorema do Virial dá:

$$2\langle K \rangle + \langle U \rangle = 0,$$

sendo K e U as energias cinética e potencial, respectivamente, de modo que

$$E = \langle K \rangle + \langle U \rangle = \langle K \rangle - 2\langle K \rangle = -\langle K \rangle.$$

Como $\langle U \rangle = -3/2kT$, o calor específico é:

$$C_v = \partial_T E \propto \partial_{\langle K \rangle} E < 0. \quad (2.3)$$

Uma vez que o calor específico é sempre positivo no ensemble canônico e pode ser negativo no microcanônico, os dois ensembles podem ser inequivalentes, ao contrário dos resultados usuais para sistemas com interações de curto alcance [22]. Uma consequência do C_v negativo no ensemble microcanônico é o surgimento de uma região de curvatura convexa no gráfico da entropia pela energia.

2.2 Sistema Autogravitante

Nesta seção vamos descrever um sistema de partículas interagindo apenas sob o efeito da força gravitacional mútua, para posteriormente introduzir a teoria cinética. Tomemos um sistema com uma densidade de massa $\rho(x)$, em um ponto x . A força $F(x)$ é obtida uma soma sobre pequenas contribuições de massa, $\delta m(x)$:

$$\delta \mathbf{F}(\mathbf{x}) = G \frac{\mathbf{x}' - \mathbf{x}}{|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|^3} \delta m(\mathbf{x}') = G \frac{\mathbf{x}' - \mathbf{x}}{|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|^3} \rho(\mathbf{x}') d^3 \mathbf{x}' \quad (2.4)$$

Integrando sobre todo o de volume:

$$F(x) = G \int \frac{\mathbf{x}' - \mathbf{x}}{|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|^3} \rho(\mathbf{x}') d^3 \mathbf{x}'. \quad (2.5)$$

O potencial gravitacional é dado por:

$$\Phi(\mathbf{x}) = -G \int \frac{\rho(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|} d^3 \mathbf{x}',$$

de forma que:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = -\nabla \Phi. \quad (2.6)$$

Tomando o divergente da Eq.(2.5) e integrando sobre uma esfera de raio $|\mathbf{x}' - \mathbf{x}| = h$ suficientemente pequeno, obtemos

$$\nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{x}) = -G\rho(\mathbf{x}) \int_{|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|=h} \frac{(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \cdot d^2S'}{|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|^3} \quad (2.7)$$

com $d^2S' = (\mathbf{x}' - \mathbf{x})hd^2\Omega$, para um elemento de ângulo sólido $d^2\Omega$. Assim

$$\nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{x}) = -4\pi G\rho(\mathbf{x}), \quad (2.8)$$

que nos dá a equação de Poisson para o potencial gravitacional Φ em relação a uma densidade de massa ρ :

$$\nabla^2\Phi = 4\pi G\rho. \quad (2.9)$$

Consideramos o caso particular de um sistema com simetria esférica. A lei de Newton da gravitação afirma que *um* corpo que se encontra dentro de uma casca esférica homogênea, não irá sofrer a atuação de nenhuma força gravitacional vinda da esfera. Como conseqüência, o potencial gravitacional dentro da esfera é constante, uma vez que $\nabla\Phi = 0$. Logo

$$\nabla \left\{ -G \int d^3\mathbf{x}' \frac{\rho\mathbf{x}}{|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|} \right\} = 0 \Rightarrow \Phi = -\frac{GM}{R}$$

Se considerar uma esfera homogênea, ou seja, com uma densidade de massa constante, $\rho = \text{constante}$,

$$M(r) = \frac{4\pi}{3}r^3\rho.$$

Soltando agora, uma massa teste, a partir do repouso, em uma órbita de raio r dentro de um campo gravitacional gerado pela esfera homogênea, temos:

$$\frac{d^2r}{dt^2} = -\frac{GM(r)}{r^2} = -\frac{4\pi G}{3}\rho r$$

que resulta em uma equação de oscilador harmônico simples:

$$\frac{d^2r}{dt^2} + \frac{4\pi G}{3}\rho r = 0$$

com

$$\omega^2 = \frac{4\pi G}{3}\rho. \quad (2.10)$$

sendo a frequência angular do sistema.

Uma vez introduzido o potencial gravitacional, iremos passar o resto da tese fazendo uma descrição da Mecânica Estatística, e mais precisamente da Teoria Cinética do mesmo.

Capítulo 3

Teoria Cinética

Este capítulo tem como objetivo apresentar uma breve introdução à teoria cinética de sistemas com interação de longo alcance. Iniciamos com uma revisão de elementos da teoria cinética. Uma vez tais conceitos estabelecidos, descrevemos como obter as equações cinéticas partindo das equações de Hamilton descrevendo a dinâmica microscópica do sistema.

3.1 O Espaço de Fase

Define-se o espaço de fase Γ de um sistema com N graus de liberdade como sendo um espaço cartesiano de $2N$ dimensões com coordenadas $\{q_l, p_l\}$, a saber a posição q e o momento p . A trajetória do sistema fica caracterizada como sendo uma curva em Γ , parametrizada pelo tempo t .

$$[q_1(t), \dots, q_N(t); p_1(t), \dots, p_N(t)]$$

Dada uma Hamiltoniana H para um sistema formado por N partículas de massas idênticas, $m = 1$, e um potencial de interação de pares $V(q)$, a

equação de Hamilton é dada por:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i<j=1}^N V(|q_i - q_j|), \\ \dot{q}_i &= \partial_{p_i} H, \\ \dot{p}_i &= -\partial_{q_i} H = - \sum_{i<j=1}^N \partial_{q_i} V(|q_i - q_j|). \end{aligned} \quad (3.1)$$

Dado o espaço de fase de um sistema de N partículas em um espaço de dimensão d

$$f_N(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N; t) (d^N q)^d (d^N p)^d$$

a probabilidade de encontrarmos as N partículas no elemento $d^{dN} q d^{dN} p$ com posições q_1, \dots, q_{dN} , com momentos p_1, \dots, p_{dN} , no instante de tempo t . A função f_N é conhecida como função distribuição de probabilidade para N partículas.

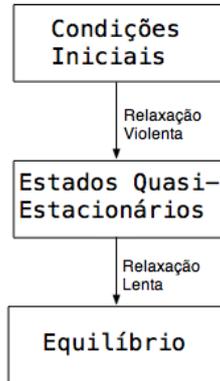


Figura 3.1: Esquematisação dos estágios da evolução dinâmica de um sistema com interação de longo alcance.

Para sistemas com interação de longo alcance a evolução dinâmica passa por algumas fases antes de atingir o equilíbrio termodinâmico, como esquematizado na Figura 3.1. Dada condição uma inicial, primeiro ocorre uma relaxação violenta, termo cunhado por Lynden-Bell em 67 [13], em um período de tempo muito curto, após o que o sistema permanece em um

período longo num estado quasiestacionário, após o qual atinge o estado de equilíbrio.

3.2 Equação de Liouville

Na secção anterior introduzimos os conceitos de espaço Γ e das trajetórias $\gamma_i \in \Gamma$. O que será feito agora é utilizar estes conceitos para se deduzir a equação de Liouville.

Considere dN o número de partículas contidas em um elemento de volume dV de Γ . Usando a definição de função densidade, pode-se escrever

$$f(p, q; t)dqdp = f(q, p; t)dV,$$

com isso

$$f(q, p; t) = \frac{dN}{dV}.$$

ou seja, $f(q, p; t)$ representa a densidade de partículas por unidade de volume $dV \in \Gamma$.

Uma vez que o sistema é conservativo

Como as trajetórias $\gamma \in \Gamma$ nunca podem se cruzar, uma vez que um sistema com N graus de liberdade fica unicamente especificado por $2N$ condições iniciais $\{q(0), p(0)\}$. Desta forma, mesmo que Γ evoluir, nunca deverá ocorrer uma intersecção entre duas trajetórias, isto se deve pelo teorema de existência e unicidade. Uma interpretação que segue diretamente é a de que dN deve ser conservado, ou seja

$$dN \rightarrow dN' = dN$$

e como o elemento de volume também deve ser conservado,

$$dV \rightarrow dV' = dV$$

assim

$$\frac{dN}{dV} \rightarrow \frac{dN'}{dV'} = \frac{dN}{dV}$$

logo, se conclui que,

$$\frac{df}{dt} = 0 \tag{3.2}$$

conhecido como teorema de Liouville.

O teorema de Liouville, de forma simplificada, afirma que em um sistema sem colisões, e com uma função distribuição $f_N = f_N(q, p; t)$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f_N(q, p; t) &= 0 \\ \partial_t f_N + \sum_{i=1}^N \left\{ \partial_{q_i} f_N \frac{dq_i}{dt} + \partial_{p_i} f_N \frac{dp_i}{dt} \right\} &= 0 \end{aligned} \quad (3.3)$$

onde usamos a notação $\{q, p\} = \{q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N\}$. Usando as Eq's.(3.1),

$$\partial_t f_N + \sum_{i=1}^N \{ \partial_{q_i} f_N \partial_{p_i} H - \partial_{p_i} f_N \partial_{q_i} H \} = 0 \quad (3.4)$$

que é conhecida como equação de Liouville.

Uma das dificuldades encontradas em se tratar da equação de Liouville é que ao se tentar determinar uma equação para a função distribuição reduzida (f.d.r.) para s partículas f_s , por meio de uma integração sobre um certo número de variáveis, não encontramos uma equação fechada, e sim um sistema infinito de equação (uma hierarquia) em que f_s depende de f_{s+1} :

$$\begin{aligned} \partial_t f_s(1, \dots, s) + \sum_{j=1}^s \mathbf{v}_j \cdot \nabla_j f_s \\ = (\lambda^2/m) \sum_{j=1}^s \int d\mathbf{x}_{s+1} d\mathbf{v}_{s+1} (\nabla_j V_{j,s+1}) \cdot \partial f_{s+1}(1, \dots, s+1) \end{aligned} \quad (3.5)$$

Desenvolvida de forma independente pelo Bogoliubov, Born, Green, Krikwood e Yvon de maneira que tal hierarquia recebeu o nome hierarquia BBGKY. Por questão de completesa uma dedução formal para a hierarquia acima será apresentada no Apêndice A

Capítulo 4

Teoria Perturbativa: Dinâmica de Correlações

Aqui será introduzida a teoria de dinâmica de correlações usando a técnica desenvolvida pelo grupo de mecânica estatística da Universidade de Bruxelas [46, 47] nas décadas de 1940 à 1970, desenvolvida por pesquisadores como Prigogine, Balescu e Resibois. Primeiramente desenvolvida para tratar de sistemas de plasma carregado, ela se apresenta como uma técnica extremamente robusta dentro da Teoria Cinética. Em sua forma original a técnica consiste em expandir as soluções da equação de Liouville em uma série de potências no potencial de pares associada a cada termo da série uma representação diagramática. Em certos casos, como veremos a seguir, podemos ressomar essa série e assim obter uma equação fechada para a distribuição reduzida a uma partícula, ou seja, a equação cinética do sistema.

4.1 Expansão da Equação de Liouville

Na teoria de mecânica clássica, quando se quer descrever a evolução dinâmica de um sistema descrito por uma Hamiltoniana,

$$H = \sum_{n=1}^N \frac{p_n^2}{2m} + \lambda \sum_{n < m=1}^N V_{nm}, \quad (4.1)$$

onde λ é um parâmetro proporcional ao fator de Kac que contem as características da interação (e^2/N para plasma, ou m^2/N para sistema gravitacional, por exemplo), e $V_{nm} = V(|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_m|)$.

Em sistemas com um grande número de partículas, o número de equações necessárias para uma descrição exata utilizando as equações de Hamilton, o que obriga a utilizar uma abordagem estatística mais viável. Uma maneira de fazer isto é usando o conceito de ensemble introduzido por Gibbs, onde ao invés de considerarmos um único sistema, tomamos um conjunto de réplicas do sistema compatíveis com os vínculos macroscópicos, com a mesma Hamiltoniana, mas com condições iniciais diferentes. Essa descrição, é feita no espaço de fase Γ que, para um sistema formado por N partículas, é composto por $6N$ coordenadas, $3N$ momentos e $3N$ posições. A dinâmica no espaço Γ é descrita pelo movimento de um ponto $(x_n, p_n) \in \Gamma$. Assim o ensemble que descreve o sistema, será uma nuvem de pontos em Γ , que matematicamente são descritos pela função distribuição para N partículas, f.d., $f_N(1 \dots N; t)$, onde usamos a notação $(\mathbf{x}_k, \mathbf{p}_k) = k$. A f.d. acima nos dá a densidade de probabilidade de encontrarmos N partículas na configuração $(1 \dots N) \in \Gamma$ em um instante de tempo t . Como vimos anteriormente, f_N satisfaz a equação de Liouville

$$\partial_t f_N + \sum_{n=1}^N \{ \partial_{x_n} f_N \cdot \dot{\mathbf{x}}_n + \partial_{p_n} f_N \cdot \dot{\mathbf{p}}_n \} = 0. \quad (4.2)$$

Usando as equações de Hamilton Eq(3.1) e a Hamiltoniana Eq(4.1), temos a equação

$$\partial_t f_N + \sum_n \mathbf{v}_n \cdot (\partial_{\mathbf{x}_n} f_N) = \lambda \sum_{n < m} (\partial_{\mathbf{x}_n} V_{nm}) \cdot \{ \partial_{\mathbf{p}_n} - \partial_{\mathbf{p}_m} \} f_N, \quad (4.3)$$

onde $\mathbf{v}_n = \mathbf{p}_n/m$. Como tratamos neste momento de partículas idênticas, vamos tomar por conveniência a unidade de massa, tal que $m = 1$ Introduzindo a notação [47]

$$\nabla_n \equiv \partial_{\mathbf{x}_n}, \quad (4.4)$$

$$\partial_n \equiv \partial_{\mathbf{v}_n}, \quad (4.5)$$

$$\partial_{n,m} \equiv \partial_{\mathbf{v}_n} - \partial_{\mathbf{v}_m} \quad (4.6)$$

que permite reescrever a Eq.(4.3) na forma,

$$\partial_t f_N + \sum_n \mathbf{v}_n \cdot (\nabla_n f_N) = (\lambda) \sum_{n < m} (\nabla_n V_{nm}) \cdot \partial_{nm} f_N. \quad (4.7)$$

Da equação acima podemos verificar que a integral de f_N sobre todas as velocidades e posições permanece constante ao longo do tempo:

$$\int d^N \mathbf{x} d^N \mathbf{v} f_N = 1. \quad (4.8)$$

O valor macroscópico de um observável, $\Lambda(x_1 \dots x_N, v_1 \dots v_N)$, é dado pelo seu valor médio:

$$\Lambda(t)_{macro} = \int d^N \mathbf{x} d^N \mathbf{v} f_N(x, v; t) \Lambda(x_1 \dots x_N, v_1 \dots v_N). \quad (4.9)$$

Novamente por uma simplicidade, iremos trabalhar com a seguinte notação [38]:

$$'(x_1 \dots x_N, v_1 \dots v_N) \equiv (1 \dots N).$$

Usualmente toda função dinâmica $\Lambda(x, v)$ pode ser decomposta de maneira única da seguinte maneira:

$$\Lambda(1 \dots N) = \Lambda_0 + \sum_{n=1}^N \Lambda_1(n) + \frac{1}{2!} \sum_{n < m=1}^N \Lambda_2(n, m) + \dots + \frac{1}{N!} \sum_{n < \dots}^N \dots \sum_{\dots < l}^N \Lambda_N(n \dots l). \quad (4.10)$$

Se considerarmos um observável contendo apenas partícula de f_N , obtemos

$$\int d1 \dots dN \sum_{n=1}^N \Lambda_1(n) f_N(1 \dots N) = N \int d1 \dots dN \Lambda_1(1) f_N(1 \dots N). \quad (4.11)$$

Dessa forma, podemos definir a f.d.r. a uma partícula por

$$f_1(1) = N \int d2 \dots dN f_N(1 \dots N), \quad (4.12)$$

de forma que

$$\langle \Lambda \rangle = \int f_2(1) \Lambda_1(1).$$

Assim, podemos escrever de forma geral para s partículas

$$\langle \Lambda \rangle = \sum_{k=1}^N \int d(1) \dots d(N) \Lambda_k(1 \dots s) f_s(1 \dots s),$$

onde a função distribuição reduzida a s partículas f_s é definida por:

$$f_s(1 \dots s) \equiv \int d(s+1) \dots d(N) f_N(1 \dots s(s+1) \dots N), \quad (4.13)$$

que representa a densidade de probabilidade de acharmos no mesmo instante de tempo t , s partículas na configuração $(1 \dots s)$.

Essa representação da Mecânica Estatística pelo conjunto de todas f.d.r. é equivalente à representação pelas f.d. no espaço de fase. Como para funções dinâmicas de interesse, temos que $\Lambda_s(1 \dots s) = 0$, para $s \geq 3$, o conhecimento de f_1 e de f_2 é suficiente para o cálculo das quantidades macroscópicas relevantes. Para que a teoria seja consistente impomos o seguinte postulado [47]:

Postulado 01: Para qualquer $s < \infty$, e $\forall(1 \dots s)$, toda f.d.r. $f_s(1 \dots s; N, v)$ tende a um número finito no o limite termodinâmico, $N \rightarrow \infty$ e $V \rightarrow \infty$ com $N/V = c \in \mathbb{R}$. Esse valor dependente de N e V apenas pela razão c .

No limite $N \rightarrow \infty$ a condição de normalização

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int f_s d1 \dots ds = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{N!}{(N-s-2)!} \right) = N^s,$$

de forma que:

$$\frac{1}{N^s} \int d1 \dots ds f_s(1 \dots s) = 1,$$

para sistemas homogêneos temos:

$$f_N(\mathbf{x}_1 + \mathbf{a} \dots \mathbf{x}_N + \mathbf{a}, \mathbf{v}_1 \dots \mathbf{v}_N; t) = f_N(x_1 \dots x_N, \mathbf{v}_1 \dots v_N; t), \quad (4.14)$$

onde \mathbf{a} é um vetor arbitrário. Desta forma, temos que a f.d.r..

Para duas partículas depende apenas da distância relativa entre elas

$$f_1(1; t) = c\varphi(\mathbf{v}_1; t), \quad (4.15)$$

$$f_2(1, 2; t) = f_2(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2; t). \quad (4.16)$$

Se tomarmos condições de contorno periódicas podemos escrever

$$f_N(\{\mathbf{x}_n + V^{1/3}\bar{\mathbf{1}}_x\}, v) = f_N(\{\mathbf{x}_n + V^{1/3}\bar{\mathbf{1}}_y\}, v) \quad (4.17)$$

$$\begin{aligned} &= f_N(\{\mathbf{x}_n + V^{1/3}\bar{\mathbf{1}}_z\}, v) \\ &= f_N(\{\mathbf{x}_n\}, v) \end{aligned} \quad (4.18)$$

onde $(\bar{\mathbf{1}}_x, \bar{\mathbf{1}}_y, \bar{\mathbf{1}}_z)$ são os vetores unitários na direção dos eixos x , y e z , respectivamente. Dessa forma podemos expandir a função distribuição em uma série de Fourier:

$$f_N(1, \dots, N) = \sum_{\mathbf{k}_1} \dots \sum_{\mathbf{k}_N} \tilde{\rho}_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_N}(\mathbf{v}_1 \dots \mathbf{v}_N) \exp\left(i \sum_{n=1}^N \mathbf{k}_n \cdot \mathbf{x}_n\right), \quad (4.19)$$

onde temos que as condições de contorno periódicas impõem que os vetores de onda k_n satisfaçam

$$\mathbf{k}_n = (2\pi/V^{1/3})\mathbf{e}_n, \quad (4.20)$$

sendo \mathbf{e}_n um vetor composto de componentes inteiras.

Para sistemas homogêneos a soma dos vetores de onda em cada componente de Fourier deve ser nula. Podemos também reagrupar os termos da série 4.19 segundo o número de vetores de onda não-nulo nessas componentes:

$$\begin{aligned} f_N &= \tilde{\rho}_{0\dots 0} + \sum_n \sum_{\mathbf{k}_n} \tilde{\rho}_{0\dots \mathbf{k}_n \dots 0} \exp(i\mathbf{k}_n \cdot \mathbf{x}_n) \\ &+ \sum_n \sum_m \sum_{\mathbf{k}_n} \sum_{\mathbf{k}_m} \tilde{\rho}_{0\dots \mathbf{k}_n \dots \mathbf{k}_m \dots 0} \exp(i\mathbf{k}_n \cdot \mathbf{x}_n + i\mathbf{k}_m \cdot \mathbf{x}_m). \end{aligned} \quad (4.21)$$

A presença de uma inomogeneidade no sistema implica componentes de Fourier com uma soma não-nula de seus vetores de onda.

Para garantirmos que todas as grandezas utilizadas na teoria sejam bem definidas (e finitas) no limite termodinâmicos (condição de regularidade), rescrevemos $f_N(1, \dots, N)$ da seguinte forma para $t = 0$:

$$\begin{aligned} f_N(x, v; 0) &= V^{-N} \left\{ \rho_0(v; 0) + \lambda \sum_n \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{v}_n | \dots; 0) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_n) \right. \\ &+ \lambda^2 \sum_n \sum_m \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \rho_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\mathbf{v}_n, \mathbf{v}_m | \dots; 0) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_n + i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}_m) \\ &+ \lambda \sum_n \sum_m \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'}(\mathbf{v}_n, \mathbf{v}_m | \dots; 0) \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_m)] + \dots \\ &\dots + \lambda^{r-s} \sum_n \dots \sum_m \sum_{\mathbf{k}_n} \dots \sum_{\mathbf{k}_m} \delta_{\mathbf{k}_a \dots \mathbf{k}_b} \dots \delta_{\mathbf{k}_c \dots \mathbf{k}_d} \\ &\times \left. \rho_{\mathbf{k}_n \dots \mathbf{k}_m}(\mathbf{v}_n, \dots, \mathbf{v}_m | \dots; 0) \exp\left(i \sum_{i=1}^r \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{x}_i\right) + \dots \right\}, \end{aligned} \quad (4.22)$$

onde $\gamma = 8\pi^3/V$ e $\delta_{\mathbf{k}}$ indica a delta de Kronecker

$$\delta_{\mathbf{k}} = \delta_{k_x,0} + \delta_{k_y,0} + \delta_{k_z,0}$$

com $\delta_{i,j} = 0$ para $i \neq j$ e $\delta_{i,j} = 1$ para $i = j$. Na equação acima usamos o símbolo $|$ em cada termo $\rho_{\mathbf{k}_n}(\mathbf{v}_n|\dots;0)$ para indicar as partículas com vetores de onda não-nulos (à esquerda da $|$) e os nulos (à direita de $|$). Dessa forma as componentes de Fourier na Eq (??) não dependam nem de N e nem de V , apenas da razão N/V . Esta condição induz à condição de normalização,

$$\int d^N \mathbf{v} \rho_0(|v;0) = 1.$$

Ao integrarmos a Eq.(??) para as $(N - 1)$ posições das partículas de 2 à N , vemos que apenas restarão as contribuições do primeiro e do segundo termos, e a função distribuição reduzida para uma partícula é escrita como

$$f_1(\alpha) = NV^{-1} \left[\rho_0(|\mathbf{v}_\alpha) + (8\pi^3/V) \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{v}_\alpha|) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_\alpha} \right], \quad (4.23)$$

com

$$\rho_0(|\mathbf{v}_\alpha) = \int d^{N-1} \mathbf{v} \rho_0(|\{\mathbf{v}\}),$$

e

$$\rho_0(v_\alpha|) = \int d^{N-1} \mathbf{v} \rho_0(\{\mathbf{v}\}|).$$

No limite $V \rightarrow \infty$ os vetores de onda se tornam variáveis contínuas e as somas são substituídas por integrais pela seguinte regra

$$(8\pi^3/V) \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \int d(\mathbf{k}).$$

Dessa forma

$$f_1(\alpha) = c \left[\rho_0(|\mathbf{v}_\alpha) + \int d\mathbf{k} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{v}_\alpha|) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_\alpha} \right]. \quad (4.24)$$

A Eq (4.24) possui um papel central na dedução das equações cinéticas, como veremos no capítulo 5, já que uma vez determinada a expressão para $\rho_0(|\mathbf{v}_\alpha)$ e para $\rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{v}_\alpha|)$, a expressão para f.d.r. f_1 fica determinada.

4.2 Solução da Equação de Liouville

Até presente momento tudo foi feito apenas para um ponto fixo no tempo, que pode ser tomado arbitrariamente como $t = 0$.

Seguindo a abordagem usada por Prigogine [48] e sua escola, primeiro resolvemos a equação de Liouville formalmente para $f_N(t)$ e a partir dessa solução deduzimos expressões para as funções distribuição reduzidas por meio de integrações. Existem diversas maneiras de se proceder. Podemos fazer uma iteração direta da equação de Liouville (como feito por Brout e Prigogine [49]) ou pelo formalismo do resolvente que foi utilizado neste problema pela primeira vez por Résibois [47]. Aqui adotaremos a segunda abordagem já que esta tem uma conexão com os diagramas que iremos utilizar. Vamos considerar a equação de Liouville escrita da seguinte forma:

$$\mathcal{L} f_N(x, v; t) = s(x, v; t), \quad (4.25)$$

onde $s(x, v; t)$ é uma função arbitrária de $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ e $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_N$ e do tempo e

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}^0 + \lambda^2 \mathcal{L}', \quad (4.26)$$

$$\mathcal{L}^0 = \partial_t + \sum_{j=1}^N \mathbf{v}_j \cdot \nabla_j, \quad (4.27)$$

$$\mathcal{L}' = \sum_{j < n} \mathcal{L}'_{jn} = -m^{-1} \sum_{j < n} (\nabla_j V_{jn}) \cdot \partial_{jn}. \quad (4.28)$$

A Eq. (4.7) é um caso particular em que $s \equiv 0$.

Vamos assumir duas funções $\psi_1(x, v; t)$ e $\psi_2(x, v; t)$ com as seguintes propriedades:

- Possuem condições de contorno periódica no espaço de configuração;
- Condições de contorno homogêneas no infinito no espaço de velocidades:

$$\psi_i \rightarrow \infty \quad \text{quando} \quad v_j \rightarrow \infty \quad \text{para qualquer } j.$$

Podemos escrever:

$$\begin{aligned} & \int d^N \mathbf{x} \int d^N \mathbf{v} \int_{t_0}^{t_1} dt \{ \psi_1 \mathcal{L} \psi_2 + \psi_2 \mathcal{L} \psi_1 \} \\ &= \int d^N \mathbf{x} \int d^N \mathbf{v} \{ \psi_1(t_1) \psi_2(t_0) - \psi_1(t_0) \psi_2(t_1) \}, \end{aligned} \quad (4.29)$$

onde a integração em \mathbf{x} é feita sobre todo o volume e a sobre \mathbf{v} sobre todo o espaço de velocidades. Sendo \mathcal{L} um operador adjunto, podemos escrever

$$\tilde{\mathcal{L}} = -\mathcal{L},$$

de maneira que podemos definir a função de Green como solução da equação:

$$-\tilde{\mathcal{L}}\mathcal{G}(xvt|x'v't') \equiv \mathcal{L}\mathcal{G}(xvt|x'v't') = \delta(x-x')\delta(v-v')\delta(t-t') \quad (4.30)$$

de modo a satisfazer a condição de casualidade

$$\mathcal{G}(xvt|x'v't') = 0 \quad \text{para } t < t'. \quad (4.31)$$

Como os coeficientes na equação de Liouville dependem do tempo apenas pela diferença $t-t'$ e considerando a condição de casualidade, \mathcal{G} pode ser escrita na forma funcional:

$$\mathcal{G}(xvt|x'v't') = \theta(t-t')G(xv|x'v'; t-t') \quad (4.32)$$

onde $\theta(x)$ é a função Heaviside. Uma vez que introduzimos a função de Green, podemos definir o Resolvente $R(xv|x'v'; z) = R(z)$ como sendo a transformada de Fourier de \mathcal{G} em relação a $t-t'$:

$$R(z) = \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') \exp[iz(t-t')] \mathcal{G}(xvt|x'v't') \quad (4.33)$$

que substituindo a Eq. (4.30) na equação acima obtemos a transformada de Laplace unilateral:

$$R(z) = \int_0^{\infty} d\tau \exp[iz\tau] G(z). \quad (4.34)$$

Temos ainda

$$G(\tau) = (2\pi)^{-1} \int_C dz \exp[-iz\tau] R(z), \quad (4.35)$$

a transformada de Laplace inversa, onde C é um contorno de integração paralelo ao eixo real. Se considerarmos agora o problema de condição inicial $\mathcal{L}f_N(x, v; t) = s(x, v; t)$ para $t \geq 0$ e $f_N(x, v; 0) = q_N(x, v)$. Fazendo $\psi_1 = f_N(x, v; t)$ e $\psi_2 = \mathcal{G}(x'', v'', t''|x, v, t)$ na Eq. (4.29) e tomando $t_0 = 0$ e $t_1 = \infty$, chegamos a:

$$f_N(x, v; t) = \frac{1}{2\pi} \int_C dz e^{-izt} \int dx' dv' R(x, v|x', v'; z) f_N(x', v'; 0). \quad (4.36)$$

Com isso provamos a proposição do Prigogine e chegamos à equação que será o ponto de partida para descrevermos uma teoria perturbativa e então introduziremos a teoria por trás dos diagramas.

Já sabemos que resolver a equação de Liouville de forma exata é impossível, o que podemos fazer é separar a equação em duas partes de maneira que a primeira pode ser resolvida de forma exata, enquanto que a segunda é resolvida na forma de uma série infinita com cada termo podendo ser calculado exatamente. Usando a primeira equação do sistema Eq. (4.26), podemos escrever a equação para a função de Green na forma:

$$\mathcal{L}_{y''}^0 \mathcal{G}(y''|y') + \lambda^2 \mathcal{L}_{y''}^1 \mathcal{G}(y''|y') = \delta(y'' - y'), \quad (4.37)$$

onde introduziremos a notação $y = \{x, v; t\}$. Se tomarmos apenas a parte não perturbada $\mathcal{G}^0(y''|y')$ escrevemos:

$$\mathcal{L}_{y''}^0 \mathcal{G}^0(y''|y') = \delta(y'' - y'), \quad (4.38)$$

que multiplicando ambos os lados por $\mathcal{G}^0(y|y')$, integrando por partes e tomando a transformada de Laplace da da função de Green resultante, obtemos o resolvente:

$$\begin{aligned} R(xv|x'v'; z) &= R^0(xv|x'v'; z) \\ &- \lambda^2 \int dx'' dv'' R^0(xv|x''v''; z) \mathcal{L}_{y''}^1 R(x''v''|x'v'; z), \end{aligned} \quad (4.39)$$

que podemos resolver por iterações sucessivas:

$$\begin{aligned}
 R(xv|x'v'; z) &= R^0(xv|x'v'; z) \\
 &- \lambda^2 \int dx_1 dv_1 R^0(x, v|x_1, v_1; z) \mathcal{L}' R(x_1, v_1|x', v'; z) \\
 &+ \lambda^4 \iint dx_1 dv_1 dx_2 dv_2 R^0(x, v|x_1, v_1; z) \\
 &\times \mathcal{L}' R^0(x_1, v_1|x_2, v_2; z) \mathcal{L}' R^0(x_2, v_2|x', v'; z) + \dots
 \end{aligned} \tag{4.40}$$

Uma vez que o resolvente possui uma dependência de pares de variáveis (x, x') e (v, v') , podemos trata-lo como um elemento de matriz $\langle xv|\mathcal{R}(z)|x'v'\rangle$ do operador $\mathcal{R}(z)$, função da variável $z \in \mathbb{C}$, de maneira que dada uma função $F(x, v)$:

$$\mathcal{R}(z)F \equiv \int dx' dv' \langle xv|\mathcal{R}(z)|x'v'\rangle F(x', v'), \tag{4.41}$$

com isso a Eq. (4.36) escrita na forma de operador se torna:

$$\begin{aligned}
 f_N(t) &= \frac{1}{2\pi} \int_C dz e^{-izt} \mathcal{R}(z) f_N(0) \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_C dz e^{-izt} \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{R}^0(z) [\mathcal{L}' \mathcal{R}^0(z)]^n f_N(0).
 \end{aligned} \tag{4.42}$$

A parte livre da equação de Liouville pode ser escrita:

$$\{\partial_t + v\partial_x\} \mathcal{G}^0(xvt|x'v't') = \delta(x - x') \delta(v - v') \delta(t - t'). \tag{4.43}$$

Vemos que ao lado esquerdo da equação acima v aparece no operador sobre \mathcal{G}^0 apenas por um fator multiplicativo, de forma que podemos introduzir o operador:

$$\Gamma(xt|x't') = (\mathcal{L}^0)^{-1} \delta(x - x') \delta(t - t'), \tag{4.44}$$

logo:

$$\{\partial_t + v'\partial_x\} \Gamma^0(xt|x't') = \delta(x - x') \delta(t - t'). \tag{4.45}$$

Essa equação foi resolvida por Andrews [43] utilizando a metodologia sugerida por Sokolov e Ivanenko [44]. O resultado é dado por:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{G}^0(\{\mathbf{x}\}, \{\mathbf{v}\}; t|\{\mathbf{x}'\}, \{\mathbf{v}'\}; t) \\
 = \theta(t - t') \prod_{j=1}^N \delta[\mathbf{x}_j - \mathbf{x}'_j - \mathbf{v}'_j(t - t')] \delta(\mathbf{v}_j - \mathbf{v}'_j),
 \end{aligned} \tag{4.46}$$

que do ponto de vista físico representa o movimento de uma partícula livre de um ponto x' no instante t' para um ponto x em um instante t ao longo de uma trajetória com uma velocidade constante $v = v'$. Já do ponto de vista matemático ela apresenta um problema. Apesar do operador \mathcal{G}^0 ser diagonal em v , ele não é diagonal em x . Afim de resolvermos este problema, basta tomarmos uma base de onda plana,

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = V^{-N/2} e^{i \sum \mathbf{k}_j \cdot \mathbf{x}_j}. \quad (4.47)$$

Com isso, podemos efetuar a mudança de representação,

$$\begin{aligned} \langle k, v | \mathcal{G}^0(t-t') | k', v' \rangle &= V^{-N} \int d^N \mathbf{x} d^N \mathbf{x}' e^{-i \sum \mathbf{k}_j \cdot \mathbf{x}_j} \\ &\times \langle x, v | \mathcal{G}^0(t-t') | x', v' \rangle e^{-i \sum \mathbf{k}_j \cdot \mathbf{v}'_j (t-t')} \\ &= \theta(t-t') \prod_{j=1}^N \delta_{\mathbf{k}_s - \mathbf{k}'_s} \delta(\mathbf{v}_s - \mathbf{v}'_s), \end{aligned} \quad (4.48)$$

com isso o operador de Green se torna diagonal, o que nos permite rescrever o operador diagonal representação de Fourier:

$$\langle kv | \mathcal{R}^0(z) | k'v' \rangle = \frac{1}{i(\sum_j \mathbf{k}_j \cdot \mathbf{v}_j - z)} \prod_{s=1}^N \delta_{\mathbf{k}_s - \mathbf{k}'_s} \delta(\mathbf{v}_s - \mathbf{v}'_s). \quad (4.49)$$

Nos problemas que encontraremos mais para frente será comprovado que é mais conveniente e simples não trabalhar com os elementos de matriz no espaço de velocidades, reduzindo o elemento de matriz acima a:

$$\langle k | \mathcal{R}^0(z) | k' \rangle = \frac{1}{i(\sum_j \mathbf{k}_j \cdot \mathbf{v}_j - z)} \prod_{s=1}^N \delta_{\mathbf{k}_s - \mathbf{k}'_s}. \quad (4.50)$$

A diferença entre as duas equações é que $\langle kv | \mathcal{R}^0(z) | k'v' \rangle$ é um número, enquanto $\langle k | \mathcal{R}^0(z) | k' \rangle$ é um operador no espaço de velocidades que no caso perturbado é um operador diferencial, ou ainda uma série de operadores diferenciais de ordens superiores.

Afim de utilizarmos a Eq. (4.36) precisamos os elementos de matriz do operador \mathcal{L}' perturbado, para tanto precisamos da expansão de Fourier da

energia de interação:

$$V_{jn}(|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_n|) = (8\pi^3/V) \sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{l}} e^{i\mathbf{l} \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_n)}, \quad (4.51)$$

e assumindo que a força de interação entre as partículas é central, temos:

$$V_{-\mathbf{l}} = V_{\mathbf{l}},$$

ou seja $V_{\mathbf{l}}$ depende apenas do valor absoluto l do vetor \mathbf{l} . Usando a Eq. (4.26) juntamente com a Eq. (4.47) e a Eq. (4.51), obtemos:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_N | \mathcal{L}'_{jn} | \mathbf{k}'_1 \dots \mathbf{k}'_N \rangle &= \\ &= V_{|\mathbf{k}'_j - \mathbf{k}_j|} i(\mathbf{k}'_j - \mathbf{k}_j) \cdot \partial_{jn} \delta_{\mathbf{k}'_j + \mathbf{k}'_n - \mathbf{k}_j - \mathbf{k}_n} \prod_{r \neq j, n} \delta_{\mathbf{k}'_r - \mathbf{k}_r}. \end{aligned} \quad (4.52)$$

Juntando as equações (4.22), (4.26) e a (4.52), chegamos a transformada de Fourier da equação de Liouville (4.7):

$$\partial_t \rho_{\{k\}}(t) + i \sum_j \mathbf{k}_j \cdot \mathbf{v}_j \rho_{\{k\}}(t) = \lambda^2 \sum_{\{k'\}} (8\pi^3/V)^{\nu' - \nu} \langle k | \mathcal{L}' | k' \rangle \rho_{\{k'\}}, \quad (4.53)$$

onde

$$\begin{aligned} (8\pi^3/V)^{\nu} &= \tilde{\rho}_{\{k\}} V^N / \rho_{\{k\}} \\ (8\pi^3/V)^{\nu'} &= \tilde{\rho}_{\{k'\}} V^N / \rho_{\{k'\}}. \end{aligned} \quad (4.54)$$

Por fim, ao substituirmos as Eq. (4.22) e Eq. (4.52) na Eq. (4.53) obtemos:

$$\begin{aligned} \rho_{\{k\}}(v, t) &= \frac{1}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \int_C dz e^{-izt} (-\lambda^2) \sum_{\{k'\}} (8\pi^3/V)^{\nu' - \nu} \\ &\times \langle \{k\} | \mathcal{R}^0(z) [\mathcal{L}' \mathcal{R}^0(z)]^n | \{k'\} \rangle \rho_{\{k'\}}(v; 0). \end{aligned} \quad (4.55)$$

A Eq. (4.55) nos permite introduzir uma representação gráfica de uma contribuição de $\rho_{\{k\}}(t)$ devida a $\rho_{\{k\}}(0)$. O dois principais elementos que definem a estrutura de um dado termo da Eq. (4.55) são os elementos de matriz $\mathcal{R}^0(z)$ e \mathcal{L}'_{jn} . A construção dos diagramas segue as seguintes regras:

- Para cada elemento de matriz $\mathcal{R}^0(z)$ associamos um conjunto de linhas superpostas, em que a extremidade esquerda representa o instante inicial enquanto a extremidade direita o estado final. O número de linhas é igual ao número de vetores de ondas não-nulos no conjunto $\{\mathbf{k}\}$;
- Cada linha é indexada por uma letra representando a partícula a qual está associada;
- Para cada elemento de matriz \mathcal{L}'_{jn} associamos um vértice em que cada linha recebe o índice j e n .

Estas regras serão utilizadas para a construção dos diagramas na próxima seção, assim como a Eq. (4.55) será a base para a construção das expressões resultantes da contribuição de cada diagrama.

4.3 Diagramas

Aqui iremos usar a teoria introduzida no capítulo para derivar a equação de Vlasov. Primeiramente iremos descrever cada um dos vértices básicos [62] para então construir os diagramas que serão utilizados para a dedução da equação de Vlasov. Em seguida iremos utilizar a Eq. (4.55) para calcular a expressão de cada um dos diagramas relevantes.

Vértices

Nesta seção, iremos descrever os seis diagramas clássicos básicos usados na teoria de dinâmica de correlações. Depois passamos ao cálculo da contribuição dos diagramas relevantes.

Diagramas básicos e suas representações matemáticas.

(A) Vértice Laço: $k'_n, k_j \neq 0$; $k_j = k'_n = 0$

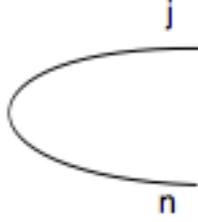


$$\langle k_j | L_{jn} | k'_n \rangle = F_{jn}(k_j) \delta_{k'_n - k_j}^{kr} \quad (4.56)$$

onde

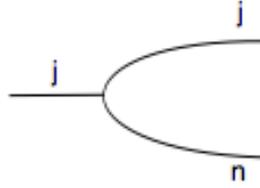
$$F_{jn}(k_j) = \frac{-4\pi^2}{\Omega} V_{k_j} (m^{-1} k_j \cdot \partial_{jn}), \quad (4.57)$$

(B) Vértice de Destruição Homogêneo: $k'_j = -k'_n \neq 0$; $k'_j = k'_n = 0$



$$\langle 0 | L_{jn} | k'_j, k'_n \rangle = F_{jn}(k'_j) \delta_{k'_j + k'_n}^{kr} \quad (4.58)$$

(C) Vértice de Destruição Não-Homogêneo: $k'_j, k'_n, k_j \neq 0$; $k_n = 0$

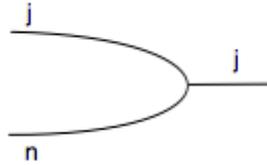


$$\langle k_j | L_{jn} | k'_j, k'_n \rangle = D_{jn}(k'_j, k_j) \delta_{k'_j + k'_n - k_j}^{kr} \quad (4.59)$$

onde

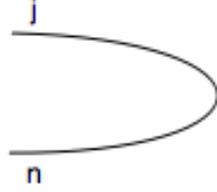
$$D_{jn}(k'_j, k_j) = -\frac{4\pi^2}{\Omega} V_{|k'_j - k_j|} m^{-1} (k'_j - k_j) \quad (4.60)$$

(D) Vértice de Criação Não-Homogêneo: $k'_j, k_n, k_j \neq 0$; $k'_n = 0$:



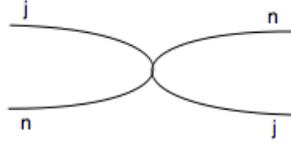
$$\langle k_n, k_j | L_{jn} | k'_j \rangle = D_{jn}(k'_j, k_j) \delta_{k'_j - k_n - k_j}^{kr} \quad (4.61)$$

(E) Vértice de Criação Homogêneo: $k_j = -k_n \neq 0$; $k'_j = k'_n = 0$



$$\langle k_j, k_n | L_{jn} | 0 \rangle = F_{jn}(k_j) \delta_{k_j+k_n}^{kr} \quad (4.62)$$

(F) Cross: $k'_j, k'_n, k_j, k_n \neq 0$



$$\langle k_n, k_j | L_{jn} | k'_j, k'_n \rangle = D_{jn}(k'_j, k'_n) \delta_{k'_j-k'_n-k_j-k_n}^{kr} \quad (4.63)$$

Escolha dos diagramas

Precisamos determinar a classe diagramas que contribuem tanto para $\rho_0(|\dots; t)$ quanto para $\rho_k(|\dots; t)$. Para a primeira função os diagramas devem começar com um vértice de destruição homogênea (vértice (B) na seção anterior) e deverá atuar à direita em um coeficiente de Fourier descrevendo a correlação de ordem de ao menos $1/N$, o que nos leva a efetuar uma soma sobre duas partículas, cada uma com contribuição de N , o que irá se anular nos termos de superfície, logo o diagrama deve ser de ordem $1/N$. Dessa maneira mesmo que adicionarmos mais vértices ao diagrama ainda teremos um diagrama independente de N e por tanto, $\rho_0(|\dots; t)$ permanece constante ao longo do tempo para essa ordem.

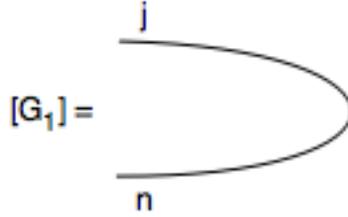
De maneira similar ao $\rho_0(|\dots; t)$, as contribuições à $\rho_k(|\dots; t)$ as únicas contribuições não nulas são os diagramas formados pelos vértices loop e vértice de destruição não-homogêneos de maneira que os diagramas pertencem ao das classes \mathcal{D} e \mathcal{F} , introduzidas na subsecção anterior. Removendo o primeiro vértice \mathcal{F} da esquerda da classe \mathcal{F} o que resulta nos diagramas

são as contribuições que desejamos. De forma similar, ao removermos o primeiro vértice dos diagramas da classe \mathcal{D} , também à esquerda, temos as contribuições à $\rho_{k'}(\alpha|\dots;t)\rho_{k-k'}(\alpha|\dots;t)$.

O que passamos a fazer nas próximas duas subsecções é justamente determinas as expressões de alguns dos diagramas que são selecionados seguindo as regras acima.

Exemplos de Diagramas com Contribuição à $\rho_0(|\dots;t)$

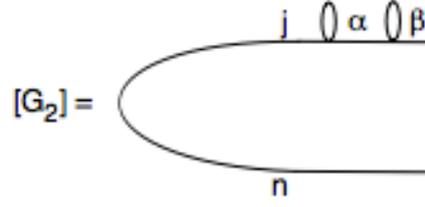
Aqui iremos apresentar as expressões dos diagramas que contribuem para o termo $\rho_0(|\dots;t)$ da Eq (4.24). Vamos começar com o diagrama de criação homogêneo e então passamos aos de destruição. Vale lembrar que λ é um parâmetro de acoplamento, já introduzido anteriormente, que pode ser tanto m^2/N , quanto e^2/N , para sistemas autogravitante e coulombiano, respectivamente.



Segue que:

$$\begin{aligned}
 [G1] &= -\frac{1}{2\pi i}(-\lambda) \int d\omega \exp[-i\omega t] \sum_{k'_j, k'_n} \sum_{j,n} \frac{(-1)}{\omega} \langle 0|L_{jn}|k'_j, k'_n \rangle \\
 &= (k'_j \cdot v_j + k'_n \cdot v_n - \omega)^{-1} \rho_{k'_j, k'_n}(n, j|\dots; 0) = \\
 &= \frac{(-\lambda)}{2\pi i} \int d\omega \exp[-i\omega t] \sum_{k_n} \sum_{j,n} \frac{(-1)}{\omega} F(-k'_n)(k'_j \cdot v_j + k'_n \cdot v_n - \omega)^{-1} \\
 &\quad \rho_{k_n, -k_n}(n, j|\dots; 0) \tag{4.64}
 \end{aligned}$$

Vamos, agora determinar a contribuição do seguinte diagrama do tipo destruição homogênea:



Segue do diagrama acima:

$$\begin{aligned}
 [G2] &= \frac{-1}{2\pi i} (-\lambda)^3 \int d\omega \exp[-i\omega t] \\
 &\quad \sum_{k'_n, k'_j, k''_a, k'''_b} \sum_{j, n, a, b} \frac{(-1)}{\omega} F_{jn}(k'_j) \delta_{k'_n + k'_j}^{kr} (k'_j \cdot v_j + k'_n \cdot v_n - \omega)^{-1} \\
 &\quad F_{ja}(k'_j) \delta_{k''_a - k'_j}^{kr} (k''_a \cdot v_a + k'_n \cdot v_n - \omega)^{-1} \\
 &\quad F_{ba}(k''_a) \delta_{k'''_b - k''_a}^{kr} (k'''_b \cdot v_b + k'_n \cdot v_n - \omega)^{-1} \rho_{k'_n, k'_n}(b, n | \dots; 0) \quad (4.65)
 \end{aligned}$$

Temos, pela lei de conservação do número de onda:

$$k'_n + k'_j = 0 \quad ; \quad k''_a - k'_j = 0 \quad ; \quad k'''_b - k''_a = 0 \Rightarrow k'''_b = k''_a = k'_j = -k'_n$$

e portanto:

$$\begin{aligned}
 [G2] &= \frac{(-\lambda)^3}{2\pi i} \int d\omega \exp[-i\omega t] \sum_{k'_n} \sum_{n, j, a, b} \frac{(-1)}{\omega} F_{jn}(k'_n) \\
 &\quad (k'_n \cdot v_n - k'_n \cdot v_j - \omega)^{-1} F_{ja}(-k'_n) (k'_n \cdot v_n - k'_n \cdot v_a - \omega)^{-1} \\
 &\quad F_{ab}(-k'_n) (k'_n \cdot v_a - k'_n \cdot v_b - \omega)^{-1} \rho_{k'_n, k'_n}(b, n | \dots; 0) \quad (4.66)
 \end{aligned}$$

Somando o $G[1]$ com o $G[2]$, Eq(4.64) e Eq.(4.66), temos

$$\begin{aligned}
 \rho_0(|\dots; t) &= \frac{(-\lambda)}{2\pi i} \int d\omega \exp[-i\omega t] \frac{(-1)}{\omega} \\
 &\quad \sum_{k'_n} \sum_{a, b, j, n} F_{jn}(-k'_n) (k'_n \cdot v_n - k'_n \cdot v_j - \omega)^{-1} \{ \rho_{k'_n, k'_n}(n, j | \dots; 0) + \\
 &\quad + (-\lambda) \sum_{a, b} F_{ja}(-k'_n) (k'_n \cdot v_n - k'_n \cdot v_a - \omega)^{-1} \rho_{k'_n, k'_n}(b, n | \dots; 0) + \\
 &\quad + (-\lambda)^3 \sum_{a, b} [Diagramas \text{ com mais } vrtices] \} \quad (4.67)
 \end{aligned}$$

Vale notar que o diagrama $G[2]$ irá contribuir para a série correspondente a todos diagrama com um termo da forma

$$\frac{-1}{\omega} \sum_{k_n} \sum_{j,n} F_{jn}(k_n) (k'_n \cdot v_n - k'_n \cdot v_j - \omega)^{-1} \quad (4.68)$$

A idéia central da presente abordagem é considerar a expansão (4.67) para $\rho_0(|\dots; t)$ como representando a solução de uma equação diferencial para $\rho_0(t)$. Tomando a derivada temporal de $\rho_0(|\dots; t)$, Eq.(14), temos

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_0(|\dots; t) &= -(\lambda) \sum_{k'_n} \sum_{n,j} F_{jn}(k'_n) \frac{(-1)}{2\pi i} \\ &\times \int d\omega \exp[-i\omega t] (k'_n \cdot v_n - k'_n \cdot v_j - \omega)^{-1}. \end{aligned} \quad (4.69)$$

A integral na equação acima corresponde justamente a todos os termos que contribuem para $\rho_{k_n, -k_n}(n, j|\dots; t)$, que é da ordem de $\lambda(\lambda c)^n$, sendo c a densidade do sistema. Utilizando a expressão (4.57) de F_{jn} , obtemos:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_0(|\dots; t) &= (-\lambda) \sum_{k_n} \sum_{j,n} \frac{4\pi^2}{\Omega} V_k (m^{-1} k_n \cdot \partial_{j_n}) \rho_{k, -k}(n, j|\dots t) \Rightarrow \\ \Rightarrow \partial_t \rho_0(|\alpha; t) &= (-\lambda) m^{-1} \int dk d^{N-1}(v) \sum_{j \neq n} \partial_{j_n} \rho_{k, -k}(n, j|\dots 0) = 0 \end{aligned} \quad (4.70)$$

que é a equação cinética para $\rho_0(|\dots; t)$. Todos os diagramas da figura abaixo possuem contribuição em $\rho_0(|\dots; t)$.

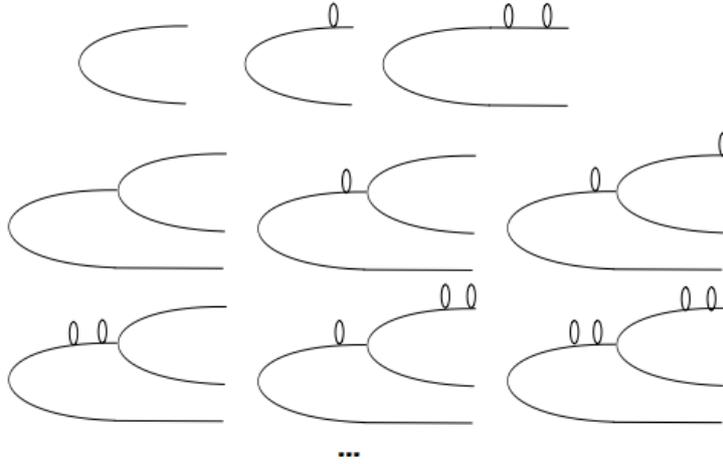


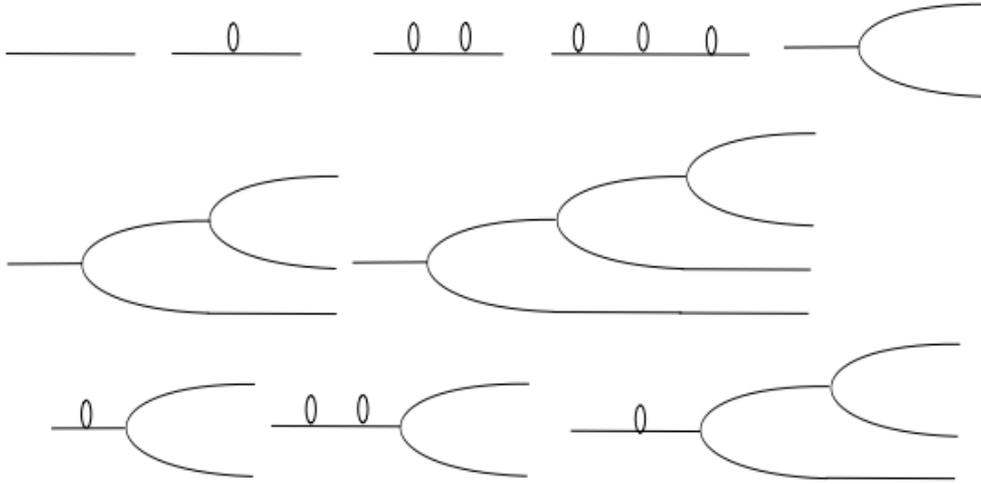
Figura 4.1: Classe de diagramas que contribuem para a $\rho_0(|\dots;t)$.

Contribuições de Primeira e Segunda Ordem para os Coeficientes $\rho_k(t)$.

As contribuições para $\rho_k(t)$ serão oriundos de diagramas que terminam à esquerda com uma única linha, os vértices de destruição não-homogêneos. Podemos decompor $\rho_{k_1 \dots k_s}(1 \dots s | \dots; 0)$ em duas partes:

$$\rho_{k_1 \dots k_s}(1 \dots s | \dots; 0) = \prod_{j=1}^s \rho_{k_j} + \rho_{[k_1 \dots k_s]}, \quad (4.71)$$

sendo o primeiro termo, proporcional a λ^0 , conhecido como o termo de não-homogeneidade e o segundo termo, proporcional à λ^n , $n \geq 2$, o termo de correlações puras, que serão responsáveis pelos termos de segunda ordem na Eq. (4.24). As contribuições ao coeficiente $\rho_k(v | \dots; t)$ são dadas pela soma dos diagramas abaixo:



A função $\rho_k(v|t)$ será a soma da contribuição de todos os diagramas que passamos a descrever abaixo. Vamos calcular explicitamente a contribuição dos primeiros diagramas da série:

$$[G1] = \underline{\text{a } \text{O} \text{ j}}$$

Segue-se

$$[L_1] = \frac{\lambda^2}{2\pi i} \int d\omega \exp[-i\omega t] \sum_j F_{\alpha j}(k_\alpha) (k_\alpha \cdot v_\alpha - \omega)^{-1} \quad (4.72)$$

$$[G2] = \underline{\text{a } \text{O} \text{ j } \text{O} \text{ n}}$$

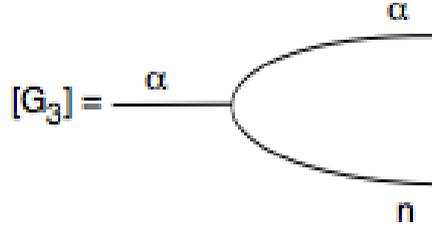
$$\begin{aligned} [L_2] &= \frac{-(-\lambda^2)^2}{2\pi i} \int d\omega \exp[-i\omega t] \sum_{k''_n, k'_j} \sum_{n,j} F_{\alpha j}(k_\alpha) (k_\alpha \cdot v_\alpha - \omega)^{-1} \\ &\times \langle k_\alpha | L_{\alpha,j} | k'_j \rangle (k_j \cdot v_j - \omega)^{-1} \langle k_j | L_{j,n} | k''_n \rangle (k_n \cdot v_n - \omega)^{-1} \\ &\times \rho_{k''_n}(n | \dots; 0) = \\ &= \frac{-\lambda^2}{2\pi i} \int d\omega \exp[-i\omega t] \sum_{n,j} (k_\alpha \cdot v_\alpha - \omega)^{-1} F_{\alpha,j}(k_\alpha) (k_\alpha \cdot v_j - \omega)^{-1} \\ &\times (k_\alpha \cdot v_n - \omega)^{-1} \rho_{k''_n}(n | \dots; 0). \end{aligned} \quad (4.73)$$

Generalizando para n -laços, temos:

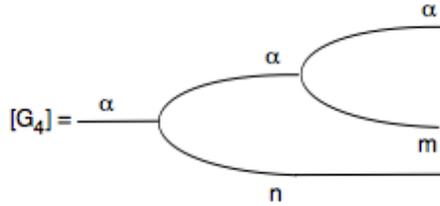
$$[\mathbf{G}_n] = \underline{\mathbf{a} \text{ () } \mathbf{a}_1 \text{ () } \mathbf{a}_2 \text{ ... } \mathbf{a}_{n-1} \text{ () } \mathbf{a}_n}$$

$$\begin{aligned} [L_n] &= \frac{-(-\lambda)^n}{2\pi i} \int d\omega \exp[-i\omega t] \sum_{a_1 \dots a_n=1}^n (k_\alpha \cdot v_\alpha - \omega)^{-1} F_{\alpha, a_1}(k_\alpha) \\ &\times (k_\alpha \cdot v_{a_1} - \omega)^{-1} F_{a_1, a_2}(k_\alpha) (k_\alpha \cdot v_{a_2} - \omega)^{-1} \times \dots \times (k_\alpha \cdot v_{a_n} - \omega)^{-1} \\ &\times \rho_{k_\alpha}(a_n | \dots; 0). \end{aligned} \quad (4.74)$$

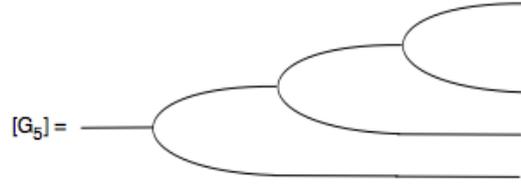
Vamos agora passar ao tratamento dos diagramas com vértices de destruição não-homogêneo.



$$\begin{aligned} [V_3] &= \frac{\lambda}{2\pi i} \int d\omega \exp[-i\omega t] \sum_{k'_n, k'_\alpha} \sum_n (k_\alpha \cdot v_\alpha - \omega)^{-1} \langle k_\alpha | L_{n\alpha} | k'_\alpha k'_n \rangle \\ &\times (k'_\alpha \cdot v_\alpha + k'_n v_n - \omega)^{-1} \rho_{k'_\alpha, k'_n}(\alpha, n | \dots; 0) = \\ &= \frac{\lambda}{2\pi i} \int d\omega \exp[-i\omega t] \sum_{k'_n, k'_\alpha} \sum_n (k_\alpha \cdot v_\alpha - \omega)^{-1} D_{\alpha, n}(k_\alpha, k'_n) \delta_{k'_\alpha + k'_n - k_\alpha}^{kr} \\ &\times (k'_\alpha \cdot v_\alpha + k'_n \cdot v_n - \omega)^{-1} \rho_{k'_\alpha, k'_n}(\alpha, n | \dots; 0) = \\ &= \frac{\lambda}{2\pi i} \int d\omega \exp[-i\omega t] \sum_{k'_\alpha} \sum_n (k_\alpha \cdot v_\alpha - \omega)^{-1} D_{\alpha, n}(k_\alpha, k'_\alpha) \\ &\times [k'_\alpha \cdot v_\alpha + (k_\alpha - k'_\alpha) \cdot v_n - \omega]^{-1} \rho_{k'_\alpha, k_\alpha - k'_\alpha}(\alpha, n | \dots; 0) \end{aligned} \quad (4.75)$$



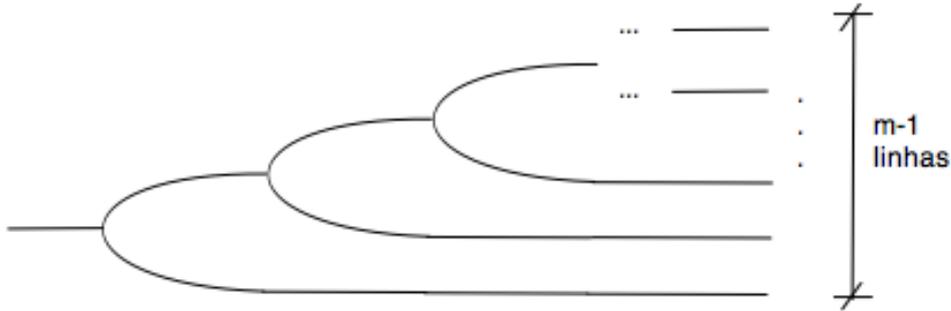
$$\begin{aligned}
 [V_4] &= \frac{-(-\lambda)^2}{2\pi i} \int d\omega \exp[-i\omega t] \sum_{k'_\alpha, k'_i, k''_\alpha, k''_j} \sum_{i,j} (k_\alpha \cdot v_\alpha - \omega)^{-1} \langle k_\alpha | L_{\alpha,i} | k'_\alpha, k'_i \rangle \\
 &\times (k'_\alpha \cdot v_\alpha + k'_i \cdot v_i - \omega)^{-1} \langle k'_\alpha, k'_j | L_{\alpha,i} | k''_\alpha, k'_j, k_i \rangle \\
 &\times (k''_\alpha \cdot v_\alpha + k''_j \cdot v_j + k'_i \cdot v_i - \omega)^{-1} \rho_{k''_\alpha, k''_j, k'_i}(\alpha, j, i | \dots; 0) = \\
 &= \frac{-(-\lambda)^2}{2\pi i} \int d\omega \exp[-i\omega t] \sum_{k'_\alpha, k'_i, k''_\alpha, k''_j} \sum_{i,j} (k_\alpha \cdot v_\alpha - \omega)^{-1} D_{\alpha,j}(k_\alpha, k'_\alpha) \cdot \\
 &\times [k_\alpha \cdot v_\alpha + (k_\alpha - k'_\alpha) \cdot v_i - \omega]^{-1} D_{\alpha,j}(k'_\alpha, k'_\alpha - k''_\alpha) \\
 &\times [(k'_\alpha - k''_\alpha) \cdot v_\alpha + k''_j \cdot v_j + (k_\alpha - k'_\alpha) \cdot v_i - \omega]^{-1} \\
 &\times \rho_{k'_\alpha - k''_\alpha, k''_j, k'_\alpha - k'_\alpha}(\alpha, j, i | \dots; 0) \tag{4.76}
 \end{aligned}$$



Para o diagrama acima, temos:

$$\begin{aligned}
 [L_5] &= \frac{-(-\lambda)^2}{2\pi i} \int d\omega \exp[-i\omega t] \sum_{k'_i, k''_j, k'''_n} \sum_{i,j,n} (k_\alpha \cdot v_\alpha - \omega)^{-1} D_{\alpha,j}(k_\alpha - k'_i; k_\alpha) \\
 &\times [(k_\alpha - k'_i) \cdot v_\alpha + k'_i \cdot v_i - \omega]^{-1} D_{\alpha,j}(k_\alpha - k'_i; k_\alpha - k'_i; k'_i - k''_j) \\
 &\times [(k_\alpha - k'_i - k''_j) \cdot v_\alpha + k''_j \cdot v_j + k'_i \cdot v_i - \omega]^{-1} \\
 &\times D_{\alpha,j}(k_\alpha - k'_i - k''_j; k_\alpha - k'_i - k''_j - k'''_n) [(k_\alpha - k'_i - k''_j) \cdot v_\alpha + k''_j \cdot v_j + k'_i \cdot v_i - \omega]^{-1} \\
 &\times \rho_{k_\alpha - k'_i - k''_j - k'''_n, k'''_n, k''_j, k'_i}(\alpha, n, j, i | \dots; 0). \tag{4.77}
 \end{aligned}$$

Podemos, desta forma, generalizar para m vértices:



$$\begin{aligned}
 [L_m] &= \frac{(-\lambda)^m}{2\pi i} \int d\omega \exp[-i\omega t] \sum_{k_{\beta_1} \dots k_{\beta_m}} \sum_{\beta_1 \dots \beta_m} (k_\alpha \cdot v_\alpha - \omega)^{-1} D_{\alpha, \beta_1}(k_\alpha - k_{\beta_1}; k_\alpha) \\
 &\times [(k_\alpha - k_{\beta_1} - k_{\beta_2}) \cdot v_\alpha + k_{\beta_1} \cdot v_{\beta_1} + k_{\beta_2} \cdot v_{\beta_2} - \omega]^{-1} \times \dots \times \\
 &\times D_{\alpha, \beta_m}(k_\alpha - k_{\beta_1} - \dots - k_{\beta_m}; -k_\alpha - k_{\beta_1} - \dots - k_{\beta_{m-1}}) \\
 &\times \left[\left(k_m - \sum_{j=1}^m k_j \right) \cdot v_\alpha + \sum_{j=1}^m k_{\beta_j} \cdot v_j - \omega \right]^{-1} \\
 &\times \rho_{k_\alpha - k_{\beta_1} - \dots - k_{\beta_m}; k_{\beta_m}; \dots; k_{\beta_1}}(\alpha, \beta_1, \dots, \beta_m | \dots; 0). \tag{4.78}
 \end{aligned}$$

A seguir mostraremos como utilizar essa abordagem para deduzir uma equação de Vlasov para o sistema gravitacional.

Capítulo 5

Equação de Vlasov para Sistemas Autogravitante

No presente capítulo, a teoria perturbativa desenvolvida no capítulo anterior será aplicada a um sistema de partículas autogravitantes para a determinação de uma do tipo Vlasov que descreve a dinâmica da distribuição de probabilidades reduzida a uma partícula, partindo da solução perturbativa para a mesma.

5.1 Hierarquia BBGKY para Partículas autogravitantes Não-Idênticas

Para partículas não idênticas a função distribuição f_N não é simétrica e portanto precisamos de uma nova hierarquia tipo BBGKY. Vamos considerar um subconjunto de s partículas, pertencentes ao conjunto original de N partículas: $\{i_k\} \equiv \{i_1, \dots, i_s\}$, onde cada i_k é diferente de outra partícula com diferente índice do conjunto original de partículas. A f.d.r. para s partículas para $\{i_k\}$ fica definida por:

$$f_s(\{i_k\}) \equiv f_s(i_1, \dots, i_s) = \int f_N(1, \dots, N) dj_1 \cdots dj_{N-s}, \quad (5.1)$$

onde $\{j_l\}$ é o subconjunto de partículas pertencente às N partículas que não contém as partículas que pertencem ao conjunto das partículas $\{i_k\}$.

Ao integrarmos a equação de Liouville

$$\frac{\partial f_N}{\partial t} = i\hat{\mathcal{L}}_N f_N, \quad (5.2)$$

em ambos os lados sobre os momentos das partículas $\{j_l\}$, e eliminando os termos de superfície, obtemos:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - \hat{\mathcal{L}}_s \right] f_s(\{i_k\}) = \sum_{k=1}^s \sum_{l=1}^{N-s} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_{i_k}} \cdot \int \frac{\partial V_{i_k j_l}}{\partial \mathbf{r}_{i_k}} f_{s+1}(\{i_k\}, j_l) dj_l, \quad (5.3)$$

onde $\hat{\mathcal{L}}_s$ é o operador Liouvilliano para s partículas e $f_{s+1}(\{i_k\}, j_l) \equiv f_{s+1}(i_1, \dots, i_s, j_l)$. Uma vez que estamos considerando que as partículas podem ter massas diferentes, a f.d.r. Eq. (5.1) deixa de ser simétrica por permutação entre duas partículas e a Eq. (5.3) é a forma final da hierarquia BBGKY que desejamos.

Para um sistema autogravitante formado por partículas de massas diferentes, a energia potencial assume a forma:

$$V_{ij} = V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = -Gm_i m_j \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3} \equiv m_i m_j h(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (5.4)$$

onde $h(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ é a força entre duas partículas de massa $m = 1$ nas posições \mathbf{r}_i e \mathbf{r}_j . Podemos usar a Eq. (5.4) para simplificar a Eq. (5.3).

Como exemplo, vamos considerar o caso $s = 1$, com a densidade de massa para uma partícula no espaço de fase sendo:

$$F_1(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \sum_{i=1}^N m_i f_1^{(i)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \quad (5.5)$$

onde $f_1^{(i)}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ é dado por $f_1(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)$ e calculada em $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}$ and $\mathbf{p}_i = \mathbf{p}$. Da mesma maneira, definimos:

$$F_2(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{r}', \mathbf{p}') = \sum_{i \neq j=1}^N m_i m_j f_2(i, j) \Big|_{i=\mathbf{r}, \mathbf{p}; j=\mathbf{r}', \mathbf{p}'}, \quad (5.6)$$

definido de forma simétrica pela permutação de \mathbf{r}, \mathbf{p} e \mathbf{r}', \mathbf{p}' . Usando Eq. (5.3) para $s = 1$ e Eqs. (5.5) e (5.6), é direto mostrar que

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right] F_1(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \int \mathbf{h}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') F_2(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{r}', \mathbf{p}') d\mathbf{r} d\mathbf{p}. \quad (5.7)$$

Uma simplificação similar não pode ser feita para $s \geq 3$ devido ao operador $\hat{\mathcal{L}}_s$ do lado esquerdo da Eq. (5.3). Podemos concluir que para partículas idênticas as correlações entre as mesmas são da ordem de $1/N$ e, portanto, podem ser ignoradas para valores de N grande. Para sistemas autogravitantes de formados por partículas idênticas, isso pode ser provado utilizando a mesma técnica diagramática utilizada para plasmas [47].

5.2 Equação Cinética para Escalas de Tempo Curtas

Nesta seção iremos deduzir a equação de Vlasov para escalas de tempo curto. Como discutido anteriormente, os diagramas que contribuem para tal escala são os do tipo laço e vértice de destruição não-homogênea, Figura. (5.1).

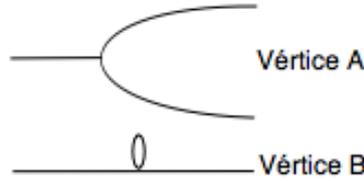


Figura 5.1: Vértices para escalas de tempo curtas.

Vale lembrar que os vértices do tipo A e os do tipo B possuem as seguintes expressões:

$$\langle k_j | L_{jn} | k'_j, k'_n \rangle = D_{jn}(k'_j, k_j) \delta_{k'_j + k'_n - k_j}^{kr} \quad (5.8)$$

$$\langle k_j | L_{jn} | k'_n \rangle = F_{jn}(k_j) \delta_{k'_n - k_j}^{kr} \quad (5.9)$$

A figura (5.2) mostra cinco dos diagramas que irão contribuir para o $\rho_k(\alpha; t)$. Para cada um dos diagramas temos as contribuições, seguindo da esquerda para a direita e de cima para baixo,

$$[D_0] = \frac{1}{2\pi} \oint_C dz \exp(-izt) \frac{i\lambda}{z - k \cdot v_\alpha} \rho_k(\alpha | \dots ; 0), \quad (5.10)$$

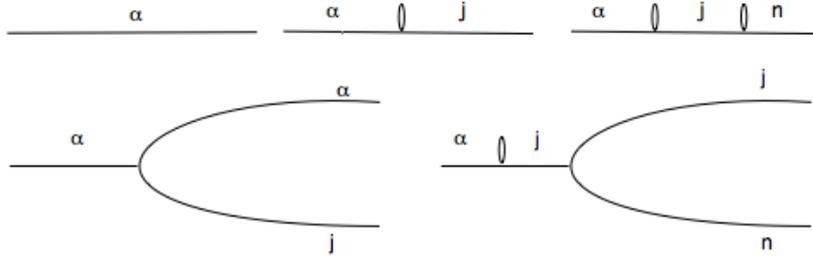


Figura 5.2: Diagramas básicos para contribuição para o sistema gravitacional. A função $\rho_k(\alpha; t)$ é formada, na verdade, por diagramas deste mesmo tipo, mas com mais ramificações

$$[D_1] = \frac{1}{2\pi} \oint_C dz \exp(-izt) \frac{i\lambda}{z - k \cdot v_\alpha} \sum_j F_{\alpha,j}(k) \frac{i\lambda}{z - k \cdot v_j} \rho_k(j|\alpha\dots; 0), \quad (5.11)$$

$$[D_2] = \frac{1}{2\pi} \oint_C dz \exp(-izt) \frac{i\lambda}{z - k \cdot v_\alpha} \sum_j F_{\alpha,j}(k) \frac{i\lambda}{z - k \cdot v_j} \sum_n F_{j,n}(k) \frac{i\lambda}{z - k \cdot v_n} \rho_k(n|\alpha, j, \dots; 0), \quad (5.12)$$

$$[D_3] = \frac{1}{2\pi} \oint_C dz \exp(-izt) \frac{i\lambda}{z - k \cdot v_\alpha} \sum_{k'} \sum_j D_{\alpha,j}(kk') \frac{i\lambda}{z - k \cdot v_\alpha - (k - k') \cdot v_j} \rho_{k'}(\alpha|\dots; 0) \rho_{k-k'}(j|\dots; 0), \quad (5.13)$$

$$[D_4] = \frac{1}{2\pi} \oint_C dz \exp(-izt) \frac{i\lambda}{z - k \cdot v_\alpha} \sum_j F_{\alpha,j}(k) \frac{i\lambda}{z - k \cdot v_j} \sum_{k'} \sum_j D_{\alpha,j}(kk') \frac{i\lambda}{z - k \cdot v_\alpha - (k - k') \cdot v_j} \rho_{k'}(n|\alpha\dots; 0) \rho_{k-k'}(j|\dots; 0), \quad (5.14)$$

Somando as cinco contribuições e organizando os termos obtêm-se a $\rho_{\mathbf{k}}(\alpha; t)$,

$$\begin{aligned}
 \rho_{\mathbf{k}}(\alpha; t) = & \frac{1}{2\pi} \int_C dz e^{-izt} \frac{i\lambda}{(z - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_\alpha)} \rho_{\mathbf{k}}(\alpha|\dots; 0) \\
 & + \frac{1}{2\pi} \int_C dz e^{-izt} \frac{i\lambda}{(z - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_\alpha)} \sum_j F_{\alpha j}(\mathbf{k}) \left\{ \frac{i\lambda}{(z - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_j)} \right. \\
 & \left[\rho_{\mathbf{k}}(j|\alpha\dots; 0) + \sum_n F_{jn}(\mathbf{k}) \frac{i\lambda}{(z - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_j)} \rho_{\mathbf{k}}(n|\alpha, j\dots; 0) \right. \\
 & + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_n D_{jn}(\mathbf{k}\mathbf{k}') \frac{i\lambda}{[z - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{v}_n - (\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{v}_j]} \\
 & \left. \left. \rho_{\mathbf{k}'}(n|\alpha, \dots; 0) \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}(j|\dots; 0) + \dots \right] \right\} \\
 & + \frac{1}{2\pi} \int_C dz e^{-izt} \frac{i\lambda}{(z - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_\alpha)} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_j D_{\alpha j}(\mathbf{k}\mathbf{k}') \\
 & \left\{ \frac{i\lambda}{[z - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{v}_\alpha - (\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{v}_j]} \rho_{\mathbf{k}'}(\alpha|\dots; 0) \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}(j|\dots; 0) + \dots \right\} + \dots
 \end{aligned} \tag{5.15}$$

Da teoria de dinâmica de correlações

$$f_1(r_\alpha, v_\alpha) = c_0 \left\{ \rho_0(|v_\alpha) + \int dk \rho_k(\alpha) e^{-k \cdot r_\alpha} \right\} \tag{5.16}$$

A função $f_1(r_\alpha, v_\alpha)$ é a solução geral de uma equação cinética. Afim de determinar de qual equação cinética a $f(r_\alpha, v_\alpha)$ é solução, precisa-se tomar a sua derivada temporal,

$$\partial_t f_1(r_\alpha, v_\alpha) = c_0 \left\{ \partial_t \rho_0(|v_\alpha) + \int dk \partial_t \rho_k(\alpha) e^{-k \cdot r_\alpha} \right\} \tag{5.17}$$

Derivando a Eq.(4.22) observa-se que os únicos termos que possuem t são as exponenciais e^{-izt} , de forma que irão aparecer termos $-iz$ no início de todas as integrais. Por simplificação, usa-se a igualdade $-iz = (-iz - k \cdot v_\alpha) + k \cdot v_\alpha$. Fazendo as substituições e colocando os termos em F e em D fora das integrais, uma vez que estes não dependem de z , obtemos as

evoluções temporais das funções ρ ,

$$\begin{aligned}
 \partial_t \rho_k(\alpha; t) &= \sum_j F_{\alpha j}(k) \rho_k(j|\alpha, \dots; t) \\
 &+ \sum_{k'} \sum_j D_{\alpha j}(kk') \rho_{k'}(\alpha|\dots; t) \rho_{k-k'}(j|\dots; t) \\
 &+ \sum_j F_{\alpha j}(k) \rho_k(n|\alpha, j, \dots; t) \\
 &+ \sum_{k'} \sum_n D_{jn}(kk') \rho_{k'}(n|\alpha, \dots; t) \rho_{k-k'}(j|\dots; t)
 \end{aligned}$$

Usando as formas dos operadores F e D , Eq.(3.50) e Eq.(3.54), substituindo o resultado de volta na Eq.(4.24) e integrando sobre todas as velocidades menos v_α e tomando o limite em que $N \rightarrow \infty$, $\Omega \rightarrow \infty$ e $N/\Omega = c$, chega-se à equação cinética desejada,

$$\begin{aligned}
 \partial_t f_1(\mathbf{r}_\alpha, \mathbf{v}_\alpha; t) + \mathbf{v}_\alpha \cdot \nabla f_1(\mathbf{r}_\alpha, \mathbf{v}_\alpha; t) &= \tag{5.18} \\
 \partial_\alpha f_1(\mathbf{r}_\alpha, \mathbf{v}_\alpha; t) \nabla_\alpha \int d\mathbf{r}_j d\mathbf{v}_j V(|\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_j|) f_1(\mathbf{r}_\alpha, \mathbf{v}_\alpha; t) &
 \end{aligned}$$

A equação acima, Eq.(5.18) é a equação de Vlasov desejada. Vale notar que além de demonstrarmos que esta é a equação natural para sistemas com interações de longo alcance, assim como Braun e Hepp [39], também obtemos a solução perturbativa da mesma, Eq.(5.16).

Na próxima seção passamos a mostrar uma série de simulações numéricas que demonstram que o nosso resultado é consistente.

Capítulo 6

Validade da Equação de Vlasov para N Finito - Aplicação a Sistemas Unidimensionais

Neste capítulo iremos mostrar que a equação de Vlasov determinada no capítulo anterior descreve bem os sistemas autogravitantes. Para tanto realizamos simulações numéricas para três modelos simplificados, o HMF, o MAAG e o modelo de folhas autogravitantes. Os métodos numéricos utilizados estão descritos no Apêndice B, onde fazemos uma pequena revisão de simulações de dinâmica molecular e solução numérica da equação de Vlasov. Em cada simulação de dinâmica molecular foi utilizada a condição inicial de *waterbag*, ou seja, uma distribuição uniforme no espaço de fase, tanto em \mathbf{p} , quanto em \mathbf{q} ,

$$f_0(p, \theta) = \begin{cases} 1/2p_0\theta_0 & \text{se } -p_0 < p < p_0 \text{ e } 0 < \theta < \theta_0, \\ 0 & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (6.1)$$

para o HMF e MAAG, e

$$f_0(p, x) = \begin{cases} 1/4p_0x_0 & \text{se } -p_0 < p < p_0 \text{ e } x_0 < \theta < x_0, \\ 0 & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (6.2)$$

para o modelo de folhas autogravitantes. As simulações realizadas nas próximas seções farão sempre uso destas condições iniciais, de maneira que iremos apenas nos referir aos valores utilizados em cada simulação

6.1 Modelo do Anel autogravitante

O toy model conhecido como Modelo do Anel autogravitante (*ring-model* em inglês), [2, 3], é formado por N partículas idênticas de massa m distribuídas sobre um anel, com interação gravitacional como mostrado na Figura 6.3. Dessa maneira o potencial de atração entre as partículas i e j é dado por

$$V_{ij} \equiv V(r_{ij}) = \frac{-Gm^2}{r_{ij}}. \quad (6.3)$$

Da Figura 6.3 vemos que $r_{ij} = \sqrt{2}R\sqrt{1 - \cos\theta_{ij}}$, e portanto:

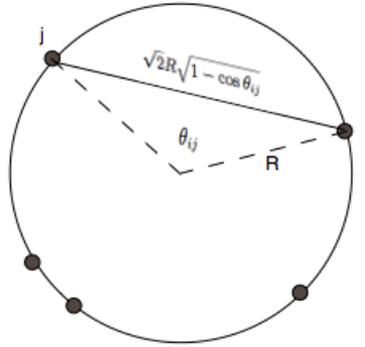


Figura 6.1: N partículas distribuídas sobre um anel de raio R . A posição relativa entre as partículas i e j é dada pela coordenada angular $\theta_{ij} = \theta_i - \theta_j$.

$$V_{ij} = \frac{Gm^2}{\sqrt{2}R\sqrt{1 - \cos\theta_{ij}}}. \quad (6.4)$$

Esse potencial diverge quando $\theta_{ij} \rightarrow 0$. Para resolver esse problema, é introduzido um parâmetro extra ϵ no potencial, denominado de parâmetro de amortecimento:

$$V_{ij} = \frac{Gm^2}{\sqrt{2}R\sqrt{1 - \cos\theta_{ij} + \epsilon}}. \quad (6.5)$$

O momento angular da partícula é dado por:

$$P_i = mR^2 \frac{d\theta_i}{dt}. \quad (6.6)$$

Com isso, a Hamiltoniana é dada por

$$H = \frac{1}{2mR^2} \sum_{i=1}^N P_i^2 - \sum_{i<j=1}^N \frac{Gm^2}{\sqrt{2R}\sqrt{1 - \cos \theta_{ij} + \epsilon}}. \quad (6.7)$$

Passamos agora ao estudo de como a dinâmica de N partículas converge para a dinâmica de Vlasov no caso do modelo do anel para dois valores de ϵ . Para tal realizamos dois tipos de simulações, ambos descritos no Apêndice A. O primeiro é uma simulação de dinâmica molecular enquanto que no segundo, resolvemos a equação de Vlasov numericamente. As simulações para o MAAG foram feitas utilizando CUDA, isso por que essa linguagem faz uso das placas de processamento gráfico (GPU, sigla em inglês) que são desenvolvidas visando a otimização de cálculos numéricos. O uso de tal linguagem nos fez ter um ganho considerável no tempo de simulação, permitindo simulações com um número cada vez maior de partículas.

Na Figura 6.2 vemos a evolução temporal, partindo de uma condição inicial da forma dada pela Eq. (6.1) da energia cinética para diferentes valores de ϵ . Nota-se que quanto menor o valor de ϵ maior o número de partículas necessárias para se ter uma boa convergência entre a dinâmica entre N partículas e a equação de Vlasov. Isto se deve ao fato de que no limite em que $\epsilon \rightarrow 0$ os efeitos colisionais começam a ter maior relevância na dinâmica do sistema.

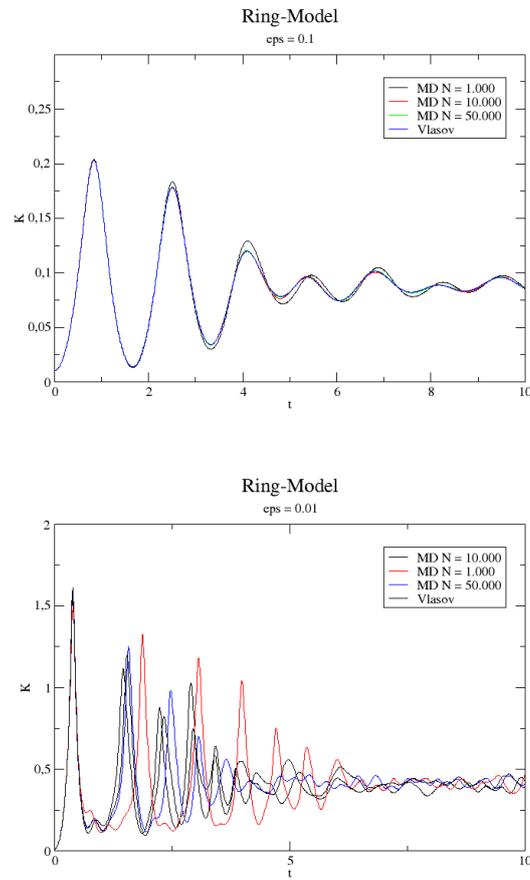


Figura 6.2: Energia cinética para MAAG para diferentes valores de ϵ . Nota-se que quanto menos o valor do referido parâmetro, mais rápido surge uma divergência entre as simulações. Isto se deve ao fato de que no limite em que $\epsilon \rightarrow 0$ os efeitos colisionais começam a ter maior relevância na dinâmica do sistema. As simulações foram realizadas com um passo de tempo $\Delta t = 10^{-3}$, $p_0 = 0.25$ e $\theta_0 = 1.0$.

6.2 Modelo HMF

O modelo que foi introduzido por S. Ruffo e M. Antoni [?], chamado de “Hamiltonian Mean Field” (HMF), é um sistema de partículas de massas iguais se movendo em um círculo, acopladas por um potencial de interação da forma $\pm[1 - \cos(\theta_i - \theta_j)]$ (atrativa ou repulsiva para o sinal + ou –, respectivamente), onde θ_i é o ângulo que dá a posição da i -ésima partícula no círculo. Uma generalização bi-dimensional do modelo HMF foi introduzida por Ruffo e colaboradores na referência [1], mas uma série de artigos sobre tal modelo pode ser achado nos livros [25, 26, 27].

A hamiltoniana para o HMF é escrita usualmente na forma

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^N [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)], \quad (6.8)$$

onde $\theta_i \in [-\pi, \pi[$ e p_i é o momento canonicamente conjugado à θ_i . Por analogia definimos a magnetização para os rotores, na forma

$$\mathbf{M} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\cos \theta_i, \sin \theta_i) \quad (6.9)$$

com componentes $M_x = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \cos \theta$ e $M_y = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sin \theta$.

Para obter as propriedades de equilíbrio desse sistema notamos que podemos escolher a origem dos ângulos do sistema de modo que $M_x = 0$. Denotando $M_y = M$, podemos escrever o potencial na forma

$$V_0 = \frac{1}{2N}(1 - M^2).$$

Assim a hamiltoniana pode ser escrita na forma

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2N}(1 - M^2). \quad (6.10)$$

Os resultados para o equilíbrio no ensemble canônico podem ser obtidos por meio da função de partição:

$$Z = \int d^N p_i d^N \theta_i \exp(-\beta H), \quad (6.11)$$

onde $\beta = (k_B T)^{-1}$, e o domínio de integração é estendido à todo o espaço de fase. Substituindo a Hamiltoniana (6.10) na função de partição (6.11) e integrando sobre os momentos, obtemos

$$Z = \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{N/2} \int_{-\pi}^{\pi} d^N \theta_i \exp \left[\frac{-\beta \varepsilon N}{2} (1 - M^2) \right].$$

Para a integração em θ utilizamos a transformação de Hubbard-Stratonovich:

$$\exp \left[\frac{\mu}{2} x^2 \right] = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp \left[-y^2 + \sqrt{2\mu} xy \right],$$

onde $\mu \in \mathbb{R}$. Com isso podemos escrever

$$Z = \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{N/2} \exp \left[\frac{-\beta \varepsilon N}{2} \right] J, \quad (6.12)$$

onde

$$J = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d^N \theta_i \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp \left[-y^2 + \sqrt{2\mu} M y \right],$$

e $\mu = \beta \varepsilon N$. Fazendo a mudança de variável $y \rightarrow y \sqrt{N/2\beta\varepsilon}$, temos então a seguinte expressão para J :

$$J = \frac{N}{2\pi\beta\varepsilon} \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp \left\{ -N \left[\frac{y^2}{2\beta\varepsilon} - \ln(2\pi I_0(y)) \right] \right\},$$

onde I_n é a função de Bessel modificada de ordem n . Por fim podemos calcular essa última integral por meio da técnica de ponto de sela no limite de campo médio ($N \rightarrow \infty$). Neste limite a energia livre de Helmholtz por partícula tem a forma

$$\beta f = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln Z}{N} = -\frac{1}{2} \left(\frac{2\pi}{\beta} \right) + \frac{\varepsilon\beta}{2} + \max_y \left\{ \frac{y^2}{2\beta\varepsilon} - \ln [2\pi I_0(y)] \right\}.$$

A condição de máximo nos leva à equação de consistência

$$\frac{y}{\varepsilon\beta} = \frac{I_1(y)}{I_0(y)}. \quad (6.13)$$

Se acoplarmos um campo externo h à hamiltoniana, e derivarmos a energia livre em relação a tal campo, para o valor nulo do campo $h = 0$ chegamos a:

$$M = \frac{I_1(\bar{y})}{I_0(\bar{y})}. \quad (6.14)$$

onde \bar{y} é a solução da equação (6.13). Uma dedução mais simples da distribuição de equilíbrio para esse sistema foi obtido por Rocha-Filho e colaboradores [30].

A Figura 6.3 mostra os gráficos de energia cinética para o modelo HMF, partindo de uma condição inicial de *waterbag* definida pela Eq (6.1). Note que temos uma boa concordância entre a dinâmica molecular e a solução numérica da equação de Vlasov já para $N = 10,000$. Vale ainda notar que essa concordância é excelente no período de relaxação violenta $t \approx 20$.

Já na Figura 6.2 temos simulações para um número de partículas constante, $N = 200.000$, mas com diferentes valores de momento linear iniciais, p_0 . Apesar de possuírem o mesmo comportamento no período inicial, logo que entram no regime de QSS, a energia inicial de cada um tende a oscilar de maneiras diferentes. Isto se deve ao fato, já mencionado, de que os QSS, por serem soluções estáveis da equação de Vlasov, são dependentes das condições iniciais. Os painéis (c) e (d), também realizados para o mesmo número de partícula, mas para diferentes valores de θ_0 .

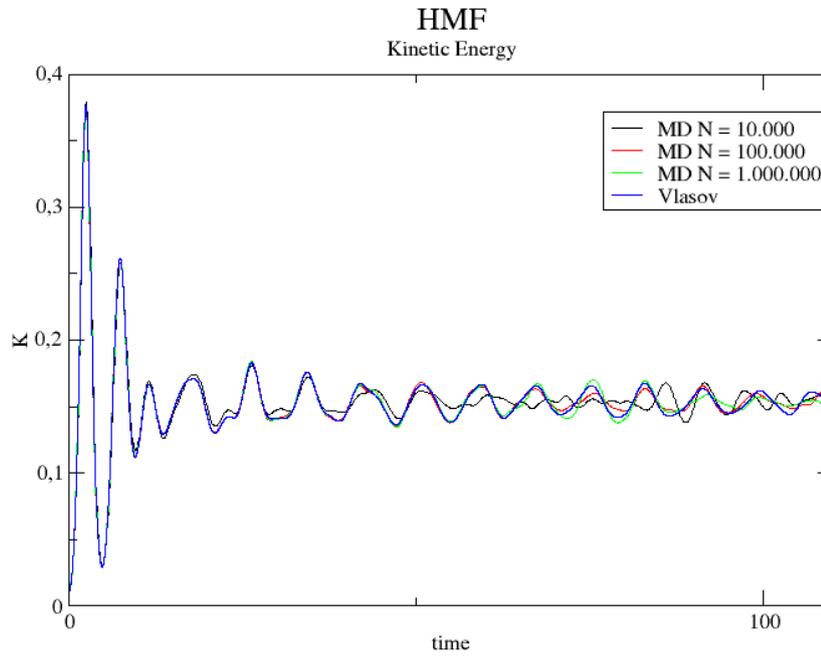


Figura 6.3: Energia cinética para o HMF, tanto dinâmica molecular, para $N = 10^4$, $N = 10^5$, $N = 10^6$, quanto para solução de Vlasov. Passo de tempo em todas as simulações foi de 0.01, $p_0 = 0.25$ e $\theta_0 = 4.0$. Para a simulação de Vlasov foi utilizado um passo de tempo de $\Delta t = 0.1$

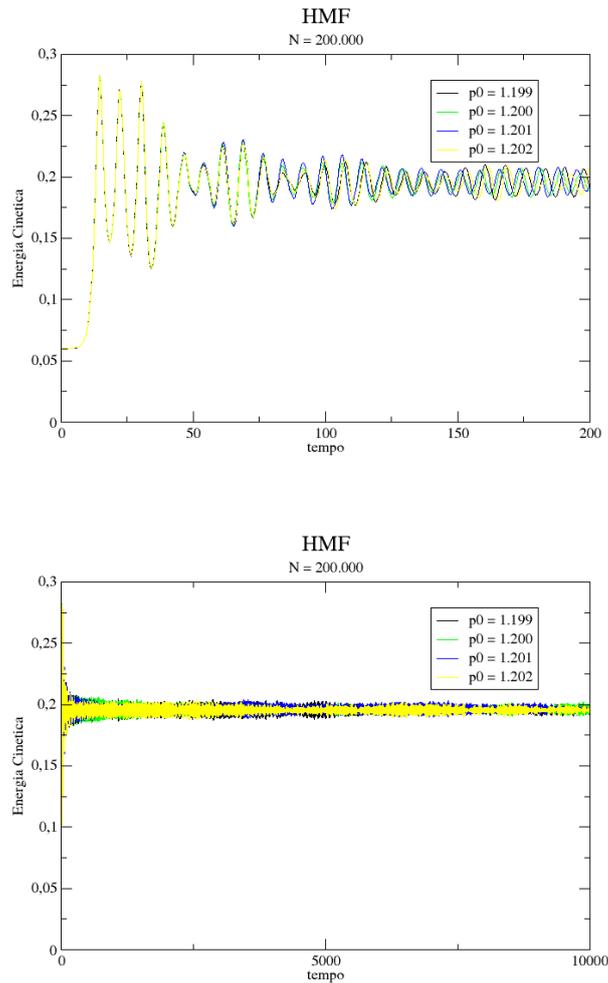


Figura 6.4: Gráficos de energia para o HMF com diferentes parâmetros iniciais para a distribuição de *waterbag* p_0 indicados nas figuras. Ambas simulações fora realizadas para $N = 200.000$ e com um passo de tempo em todas as simulações foi de 0.01.

Na Figura 6.5 temos a evolução temporal das magnetizações para o HMF. Nota-se que se tem a mesma concordância entre as simulações de dinâmica molecular e a solução numérica da equação de Vlasov.

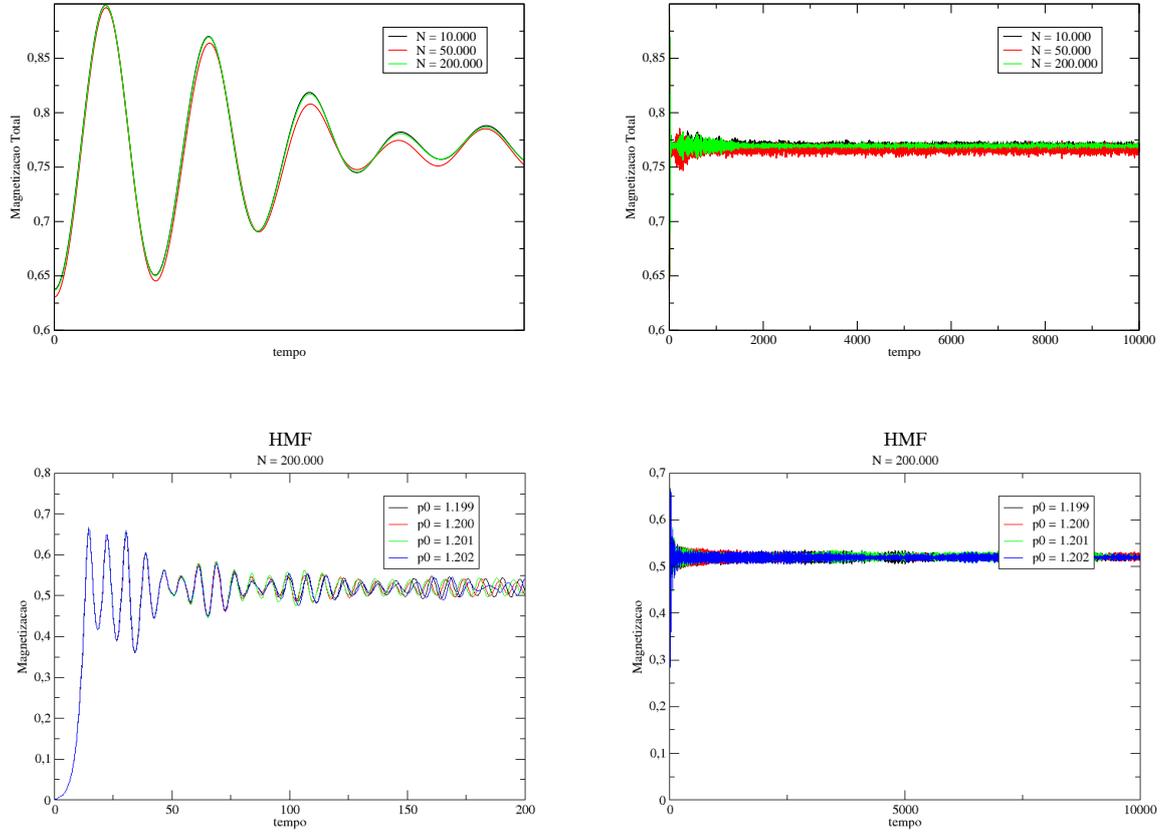


Figura 6.5: Magnetização total para o HMF. Nos gráficos de cima temos diferentes valores de N , enquanto que nos dois de baixo temos diferentes valores de energia cinética inicial com o número de partículas fixo em $N = 200.000$, com $\Delta t = 0.01$.

Os resultados apresentados no Capítulo 05 mostram que a ordem de magnitude das correlações são preservadas pela dinâmica e que portanto, todas as correlações entre partículas são criadas dinamicamente, ou seja, que a equação de Vlasov é válida em qualquer estágio da evolução com um erro de $\mathcal{O}(1/N)$ considerando a f_1 dada no instante da condição inicial da equação de Vlasov. A partir de então, esta solução irá se desviar da função distribuição para $N < \infty$ devido aos termos de colisão da ordem de $1/N$ ou

menor. Afim de medirmos as correlações entre partículas precisamos lembrar que o teorema do limite central afirma que a distribuição de uma soma de n variáveis aleatórias, identicamente não-correlacionadas x_i da forma

$$X^{(n)} = \sum_{i=1}^n x_i \quad (6.15)$$

converge para uma distribuição Gaussiana no limite $n \rightarrow \infty$. Uma boa medida do desvio da $X^{(n)}$ é a Kurtosis, que em sua forma normalizada e centralizada é escrita na forma:

$$\mathcal{K} = \left\langle \frac{(X^{(n)} - \langle X^{(n)} \rangle)^4}{\sigma_X^4} \right\rangle \quad (6.16)$$

Desta maneira medimos as correlações entre as partículas particionando o conjunto das N partículas em grupos de N/M com M partículas cada. Dessa maneira definimos as variáveis para $k = 1, \dots, N_r = N/M$:

$$\begin{aligned} y_k &= \sum_{i=1}^M \theta_{(k-1)M+i}, \\ z_k &= \sum_{i=1}^M p_{(k-1)M+i}, \end{aligned} \quad (6.17)$$

e as variáveis reduzidas:

$$\begin{aligned} \tilde{y}_k &= (y_k - \langle y \rangle) / \sigma_y, \\ \tilde{z}_k &= (z_k - \langle z \rangle) / \sigma_z, \end{aligned} \quad (6.18)$$

onde $\langle \dots \rangle$ representa a média estatística e σ_y e σ_z são os desvios padrões de y e z , respectivamente. Se as partículas não são correlacionadas o teorema do limite central afirma que as distribuições y_k e z_k tendem rapidamente a uma Gaussiana a medida que aumentamos o M . A Figura 6.6 representa bem esta afirmação. Notamos que enquanto para $N_r = 100$ observamos uma flutuação em torno de 3, quando aumentamos para $N_r = 10,000$ temos uma clara convergência para $\mathcal{K} = 3$.

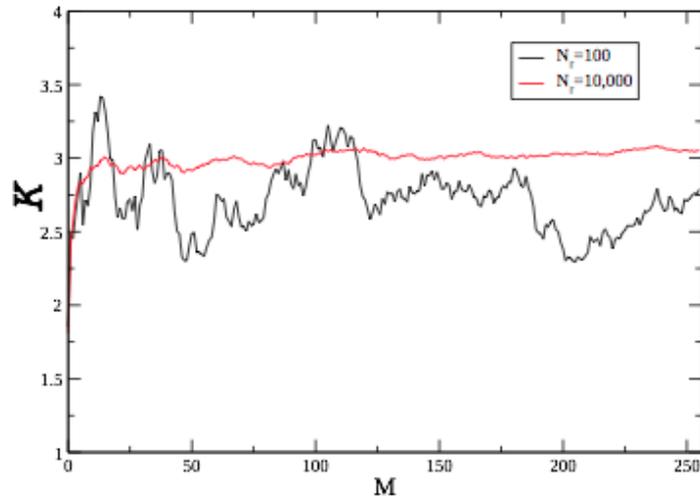


Figura 6.6: Kurtosis para uma soma de M variáveis aleatórias não correlacionadas. $1 \leq M \leq 256$ com $N_r = 100$ e $N_r = 10,000$ realizações. $N = 262,144$ e energia total por partícula $E = 0.5879$

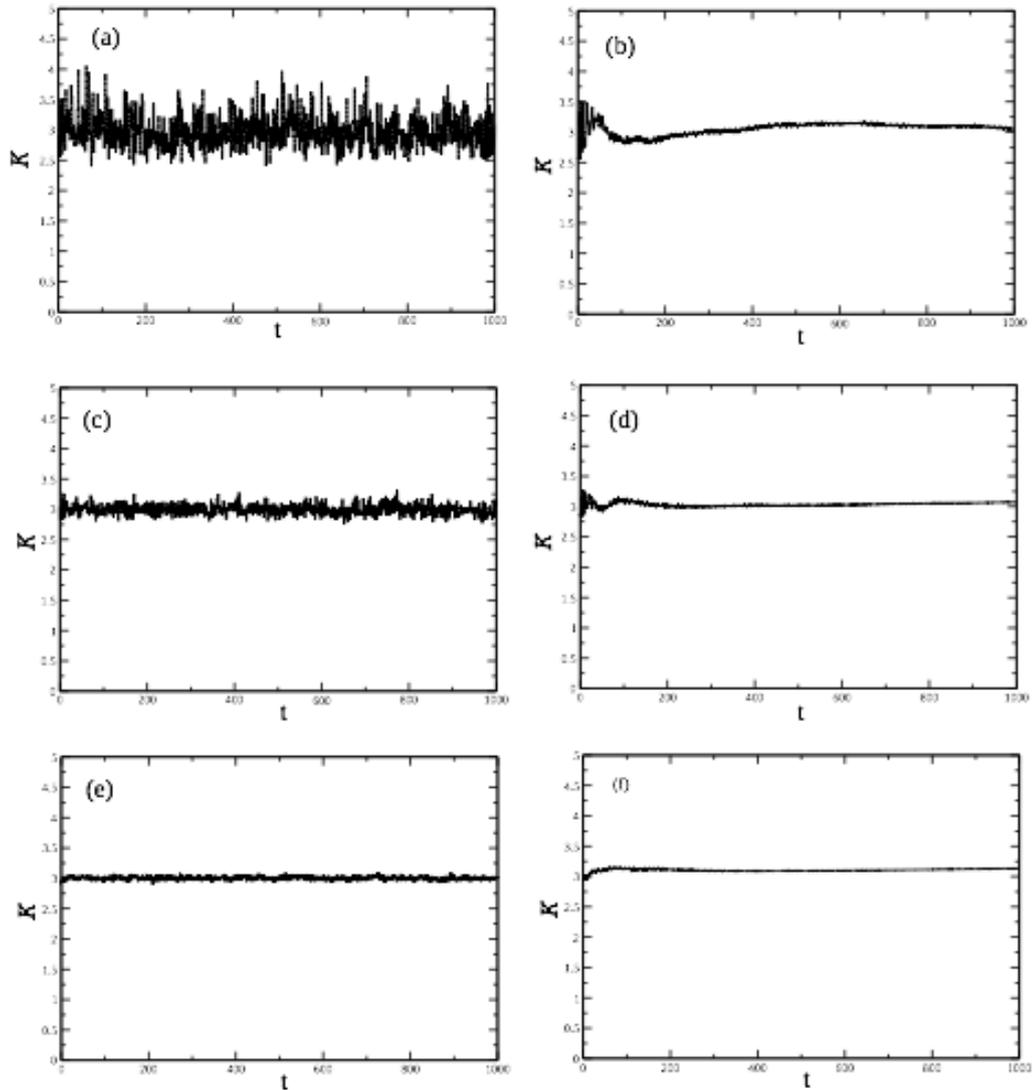


Figura 6.7: Kurtosis para Eq. (6.18) para o modelo HMF. Os painéis (a), (c) e (e) apresentam a Kurtosis \mathcal{K}_p para a soma de variáveis de momenta para $N = 100,000$, $N = 1,000,000$ e $N = 10,000,000$ respectivamente. Enquanto que nos painéis (b), (d) e (f) temos a Kurtosis para a variável ângulo \mathcal{K}_θ

A figura 6.7 mostra uma série de simulações realizadas a partir de uma distribuição inicial de *waterbag* homogênea até o estado final de equilíbrio

termodinâmico. Observamos facilmente que tanto para \mathcal{K}_p , quanto para \mathcal{K}_θ tendem exatamente para a Gaussiana para todos os valores de N utilizados. Isso ocorre por dois motivos, a correlação entre as partículas se tornam pequenas de acordo com o a descrição do campo médio vai tomando conta e tendendo à dinâmica real e ainda temos o fato de que o numero de realizações N_r das variáveis somadas aumenta.

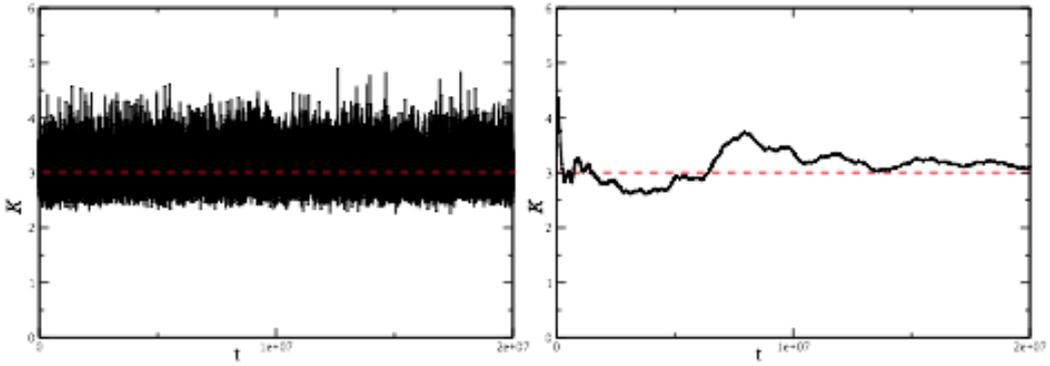


Figura 6.8: Kurtosis para as variáveis definidas pela Eq. (??) para o modelo HMF. $N = 100,000$ e $M = 256$. Tempo final de simulação 2×10^7 . O sistema se encontra no equilíbrio termodinâmico ao final da simulação o que fica bem aparente com a linha vermelha em $\mathcal{K} = 3$. Condições iniciais de *waterbag* com $p_0 = 0.0726$ e $\theta_0 = 2\pi$, o que corresponde a uma magnetização inicial nula e energia total por partícula de 0.5879. Passo de tempo utilizado $\Delta t = 0.1$.

Hoje está bem estabelecido que estes estados quasi-estacionários na verdade são soluções estáveis da dinâmica de Vlasov e aparecem devido a pequenas colisões de correção na equação de Vlasov, mesmo sendo de curta duração. Foi mostrado por Yamaguchi, *et. al.* [42] que para o HMF que uma função distribuição homogênea, $f(p)$ a uma partícula que seja uma solução da equação de Vlasov no regime dos QSS, será estável se a seguinte condição for respeitada

$$I[f] = 1 + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f'(p)}{p} dp > 0. \quad (6.19)$$

Este resultado está representado pela Figura 6.9, onde foi feita uma simulação com $N = 10.000.000$ partículas, para uma distribuição inicial homogênea dada por $f(p) = 1/p_0$ se $-p_0 < p < p_0$ e $f(p) = 0$ caso contrário. Desta maneira, o tempo de vida de um QSS homogêneo é dado pelo tempo em que $I[f]$ se torna negativo, e como resultado dos efeitos de colisão acumulados, independentemente da presença de quaisquer correlações criadas a partir de colisões ou o tempo decorrido desde os estados iniciais não-correlacionados. Este resultado está ilustrado na Figura 6.9.

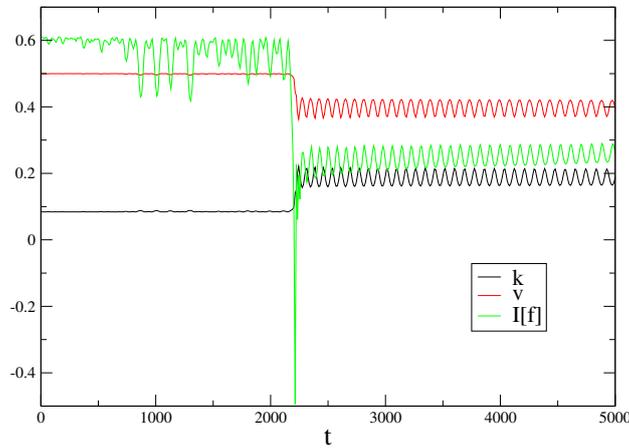


Figura 6.9: Energias cinética e potencial e o parâmetro de instabilidade, $I[f]$ definido por Eq(6.19), para uma distribuição inicial de *waterbag* homogênea.

6.3 Folhas autogravitantes

Um dos principais motivos pelos quais os modelos simplificados são utilizados, reside no fato de que o tempo de relaxação de um sistema simples como a interação gravitacional entre duas partículas em uma galáxia leva cerca de 10^{17} anos para relaxar [5], enquanto que o tempo de vida do Universo é da ordem de 10^{10} anos, ou seja, não tem-se nenhuma galáxia em

equilíbrio térmico. Como já mencionado no capítulo anterior, um dos *toy models* utilizados é o de folhas autogravitantes [6, 7, 8, 9, 10, 11, 12], em que N planos infinitos de massa m_i , $0 \leq i \leq N$, estão se movendo ao longo de uma linha reta. Tais planos podem cruzar um através do outro, caracterizando uma colisão entre eles.

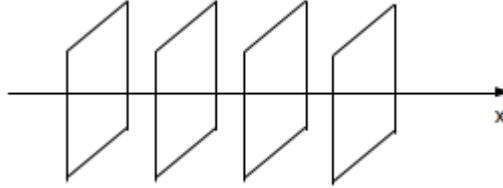


Figura 6.10: Modelo de folhas autogravitantes

A hamiltoniana é dada por

$$H(X, P) = \sum_{j=1}^N \frac{P_j^2}{2m_j} + 2\pi G \sum_{j < k}^N m_j m_k |X_j - X_k| \quad (6.20)$$

A hamiltoniana acima não é extensiva, uma vez que não existe uma dependência do termo de potencial com o número de partículas. Para se resolver este problema, é realizada a transformação canônica

$$X = \frac{x}{a} \quad ; \quad P = ap \quad ; \quad a = (2\pi GN)^{1/3} m,$$

onde passa-se a considerar que todas as folhas possuem a mesma massa, $m_i = m$, para $0 \leq i \leq N$. Desta forma, a Eq.(6.20) fica na forma

$$H(x, p) = \frac{a^2}{m} \left\{ \sum_{j=1}^N \frac{p_j^2}{2} + \frac{1}{N} \sum_{j < k}^N |x_j - x_k| \right\}. \quad (6.21)$$

Pode-se ainda efetuar uma reescala no tempo, de maneira que $a^2 m = 1$. Desta forma

$$H(x, p) = \sum_{j=1}^N \frac{p_j^2}{2} + \frac{1}{N} \sum_{j < k}^N |x_j - x_k|. \quad (6.22)$$

A Eq.(6.22) é a forma final que será utilizada nas simulações numéricas. Vale ainda ressaltar que a equação cinética para tal sistema é uma equação de Vlasov,

$$\partial_t f + \partial_p H_1 \partial_x f - \partial_x H_1 \partial_p f = 0 \quad (6.23)$$

obtida pela aproximação de campo médio

$$\Phi[f](x; t) = \iint_{R^2} |x - x'| f(x', p; t) dx' dp, \quad (6.24)$$

onde

$$H_1(x, p; t) = \frac{p^2}{2} + \Phi[f](x; t). \quad (6.25)$$

Ainda sobre o sistema de folhas autogravitantes em uma dimensão, pode-se escrever a força entre duas das N folhas, de forma independente de sua separação [9]

$$F_{ij} = -2\pi m^2 G \frac{x_i - x_j}{|x_i - x_j|} = -2\pi m^2 G \operatorname{sgn}(x_i - x_j). \quad (6.26)$$

Desta maneira, a força que atua sobre a partícula i , em qualquer instante pode ser expressa como

$$F_{ij} = -2\pi m^2 G [N_+^i - N_-^i], \quad (6.27)$$

onde N_+^i é o número de folhas à direita de i e N_-^i à sua esquerda. Aplicando a transformação canônica anterior e a mesma re-escala de tempo, obtemos

$$F_{ij} = \frac{1}{N^2} [N_+^i - N_-^i]. \quad (6.28)$$

A figura 6.3 mostra que temos uma excelente concordância entre as simulações de dinâmica molecular (MD) e a solução numérica da equação de Vlasov. Observamos dois períodos de relaxação, um de relaxação violenta, $t \approx 20$ e um de período mais longo, $t \approx 100$.

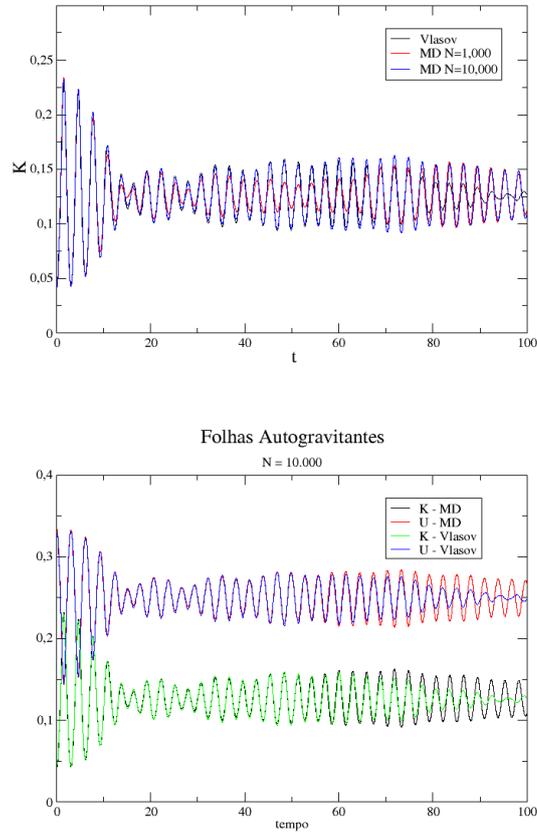


Figura 6.11: Gráficos da energia para o modelo de folhas autogravitantes. No painel (a) temos a energia cinética ao longo do tempo tanto para simulação de dinâmica molecular quanto para Vlasov. No painel (b) temos tanto a energia cinética, K , quanto a energia potencial U . Passo de tempo para DM $\Delta t = 0.01$. Para a simulação de Vlasov $\Delta t = 0.1$

A forma da Eq.(6.28) é de grande ajuda do ponto de vista de integração numérica, uma vez que precisa-se resolver apenas equações quadráticas para se determinar o tempo até a próxima colisão. Além disso, ainda tem o fato de que em uma dimensão, a colisão entre duas partículas, sem descontinuidade nas velocidades, é equivalente a uma colisão elástica, *i.e.* ocorre apenas uma troca entre as velocidades das partículas. Estes fatos levam ao

uso de uma simulação numérica de dinâmica molecular com *event driven*, em que os passos de integração são determinados pela próxima colisão entre duas folhas (evento).

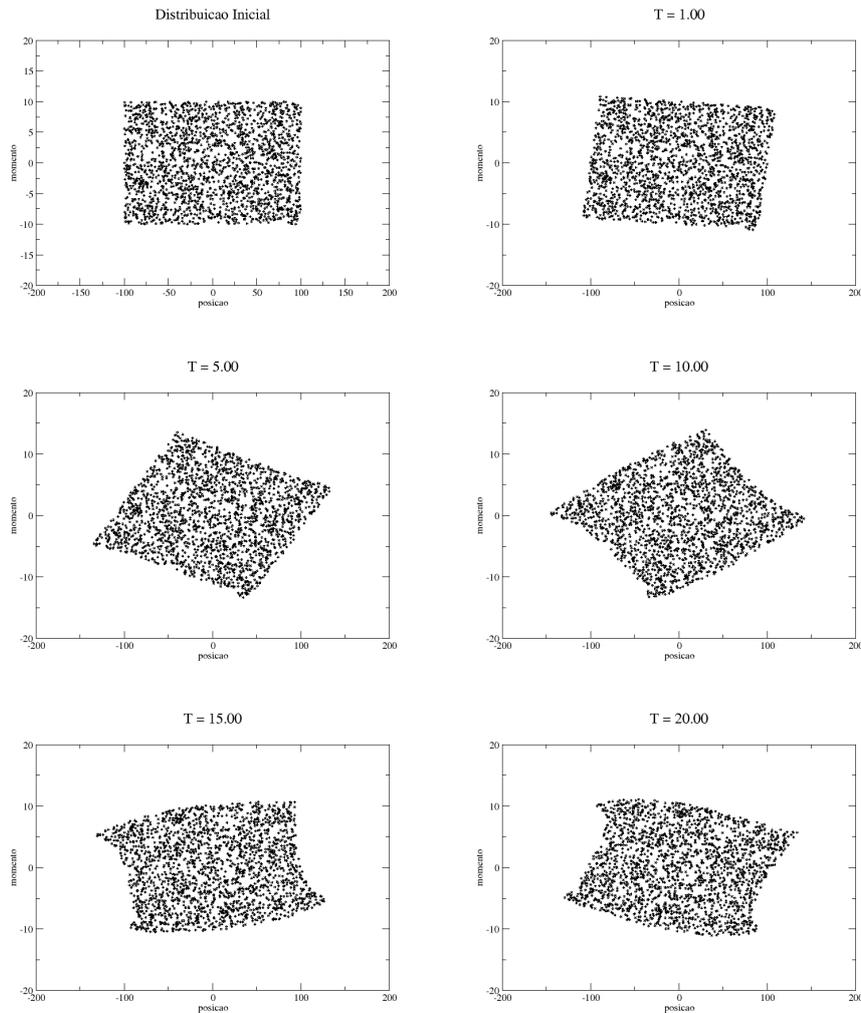


Figura 6.12: Evolução do espaço de fase para o modelo de folhas autogravitantes. O intervalo de tempo escolhido, de até $T = 20.00$ corresponde ao período de relaxação violenta. $p_0 = 10.0$ e $x_0 = 100$, enquanto o passo de tempo foi de $\Delta t = 0.01$ e $N = 200,000$

A figura 6.12 apresenta uma série de estágios do espaço de fase durante

a primeira fase de relaxação. Vemos que mesmo passado o período de relaxação violenta, $t \approx 20$, o sistema ainda não relaxou para o QSS. Já na figura 6.13 temos duas simulações mais longas $t = 100$, para $N = 1,000$ e $N = 10,000$, onde já observamos a formação de uma estrutura de core-halo. Nesta fase o sistema já se encontra nos estados QSS.

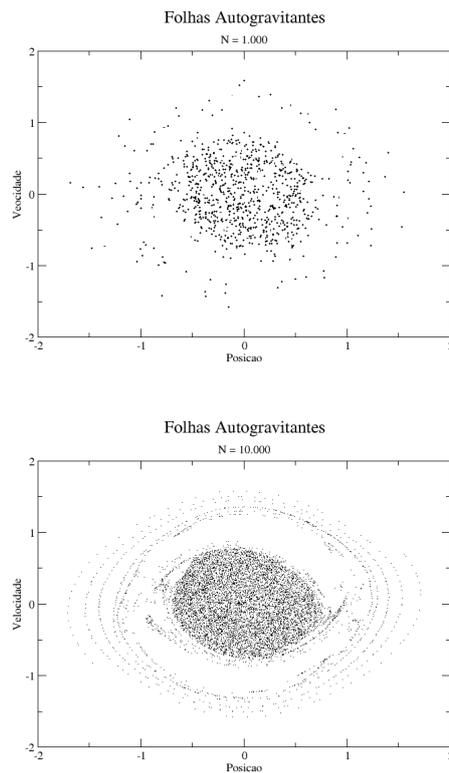


Figura 6.13: Estrutura final, para $t_f = 100$, do espaço de fase de um sistema de folhas autogravitantes. Observa-se a formação de uma estrutura core-halo. Painel (a) $N = 1000$ e painel (b) $N = 10.000$.

Capítulo 7

Segregação de Massas

Por séculos os astrônomos observam que os aglomerados de estrelas não possuem uma distribuição uniforme [58]. Isto ocorre devido ao fato de que as estrelas que compõem as galáxias não possuem massas iguais. Isto é facilmente observado pela estrutura de *core-halo*, onde a maior parte das estrelas se concentram no centro da estrutura, demonstrando uma tendência formarem uma região de maior densidade.

O fenômeno de segregação de massas [59, 60] continua como um problema em aberto e de grande interesse na astronomia e astrofísica. Uma das questões que continua sem solução é se tal fenômeno é dinâmico ou primordial(inerente ao sistema).

Existem algumas maneiras de se medir a segregação de massas em tais estruturas [59, 60], tal como o estudo das dimensões fractais das estruturas formadas, muito utilizada em sistemas tridimensionais, principalmente observando galáxias reais e não construídas por modelos computacionais, como Orion, por exemplo. A abordagem utilizada aqui é a de análise das funções distribuição, tanto dos momentos, quanto das posições geradas a partir do espaço de fase gerado.

Os sistemas apresentados até agora são formados por N partículas de mesma massa, $m = 1$, mas como estamos interessados no problema de segregação de massas, precisamos de um sistema formado por partículas de diferentes massas e para tanto introduzindo uma distribuição uniforme-

mente de massas em um intervalo $[m_{min}, m_{max}]$, de maneira que o potencial binário fica na forma,

$$V_{ij} = \sum_{i<j=1}^N m_i m_j V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|). \quad (7.1)$$

ou seja, o produto das massas passa a ter um papel fundamental na evolução do sistema. O nosso objetivo aqui é demonstrar que modelos simplificados, neste caso o HMF, podem ser usado no estudo do problema de segregação de massas. Na próxima seção introduziremos o modelo HMF com massas diferentes e então seguiremos para uma série de simulações que mostram o surgimento da segregação de massas para o mesmo.

7.1 Hamiltonian Mean Field

Para um sistema formado por massas diferentes, o potencial para o HMF pode ser rescrito na forma

$$V_{ij} = \frac{1}{2N} \sum_{i<j=1}^N m_i m_j [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)], \quad (7.2)$$

de maneira que a Hamiltoniana fica

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2N} \sum_{i<j=1}^N m_i m_j [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)]. \quad (7.3)$$

A força sobre a partícula i segue diretamente

$$F_i = m_i [\cos \theta_i M_y - \sin \theta_i M_x], \quad (7.4)$$

com as magnetizações definidas

$$\begin{aligned} M_x &= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N m_j \cos \theta_j \\ M_y &= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N m_j \sin \theta_j \end{aligned}$$

de maneira tal que o potencial por partícula assume a forma

$$v = \frac{1}{2} \langle m \rangle^2 - \frac{1}{2} [M_x^2 + M_y^2] \quad (7.5)$$

onde

$$\langle m \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N m_i \quad (7.6)$$

é a massa média do sistema. Vamos agora passar à análise das simulações numéricas realizadas. Os parâmetros utilizados estão descritos nas legendas das figuras.

A Figura. 7.1 apresenta a energia cinética para o sistema descrito acima. Podemos observar que o período de relaxação violenta possui uma oscilação mais longa, além de termos pequenas oscilações no período dos QSS. Tais oscilações dão origem a uma ressonância entre as partículas o que acarreta na segregação de massas.

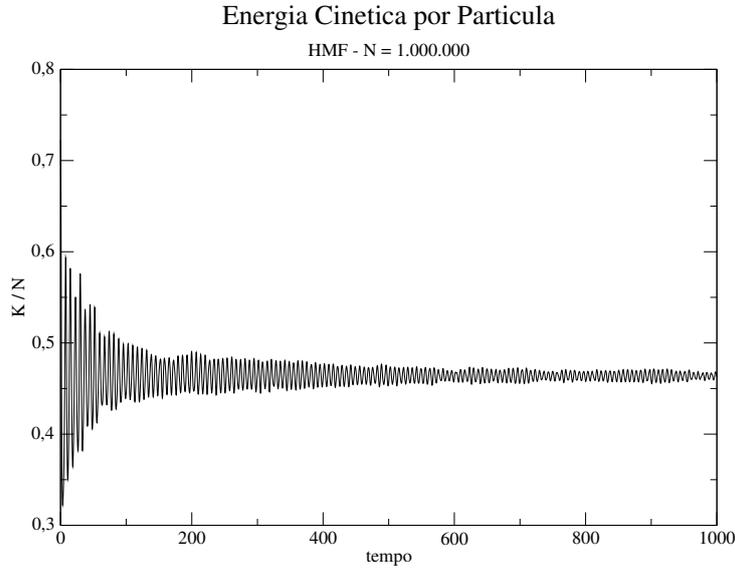


Figura 7.1: Energia cinética por partícula para HMF com massas uniformemente distribuídas no intervalo $[1.0, 2.0]$. $N = 1.000.000$ com passo de tempo $\Delta t = 0.5$. O sistema inicialmente gerado com $\theta_0 = 2.0$ e $p_0 = 0.0$ (sistema frio).

Já na figura. 7.1 temos a distribuição de partículas em relação às posições. Observa-se que temos uma maior concentração de partículas mais massivas na região do core, o que caracteriza o fenômeno de segregação de massas. Em contra-partida temos uma maior concentração de partículas menos massivas na região do halo.

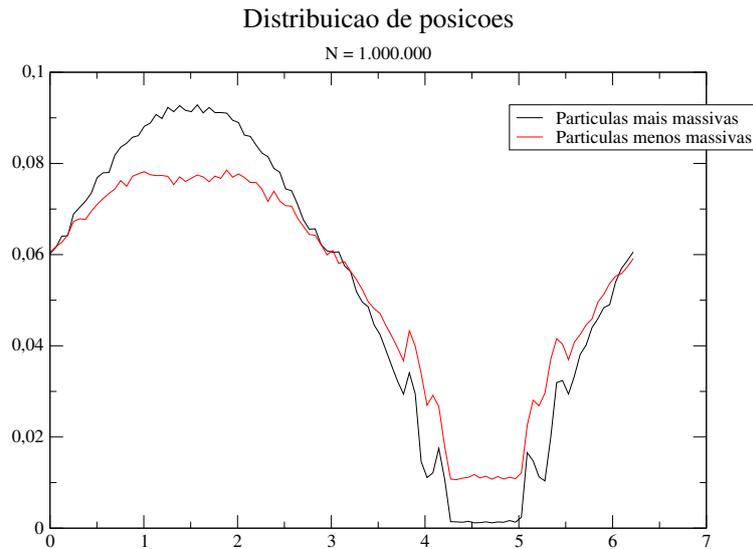


Figura 7.2: Distribuição de posições. $N = 1.000.000$ com passo de tempo $\Delta t = 0.5$. O sistema inicialmente gerado com $\theta_0 = 2.0$ e $p_0 = 0.0$ (sistema frio), para um tempo final de 10.000.

A figura. 7.1 nos mostra a distribuição de momentos, onde observamos que temos mais partículas menos massivas com um maior momento, do que as mais massivas. Este resultado é o esperado uma vez que as partículas que se encontram no halo possuem uma velocidade maior.

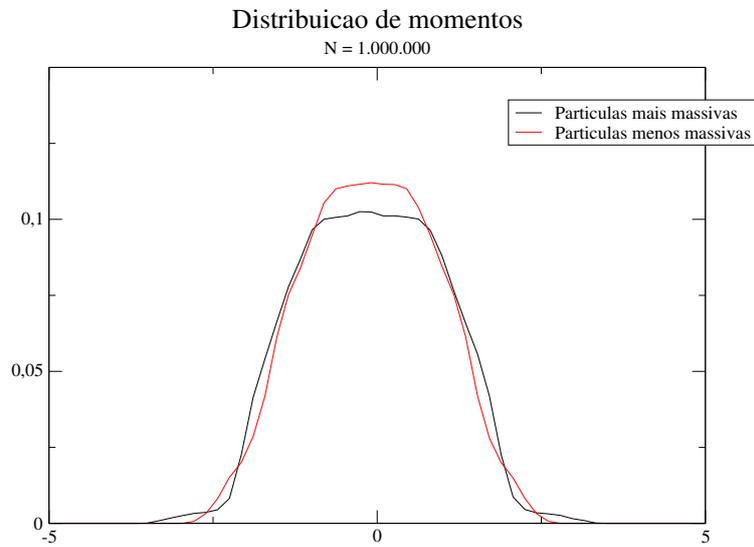


Figura 7.3: Distribuição de momentos. $N = 1.000.000$ com passo de tempo $\Delta t = 0.5$. O sistema inicialmente gerado com $\theta_0 = 2.0$ e $p_0 = 0.0$ (sistema frio), para um tempo final de 10.

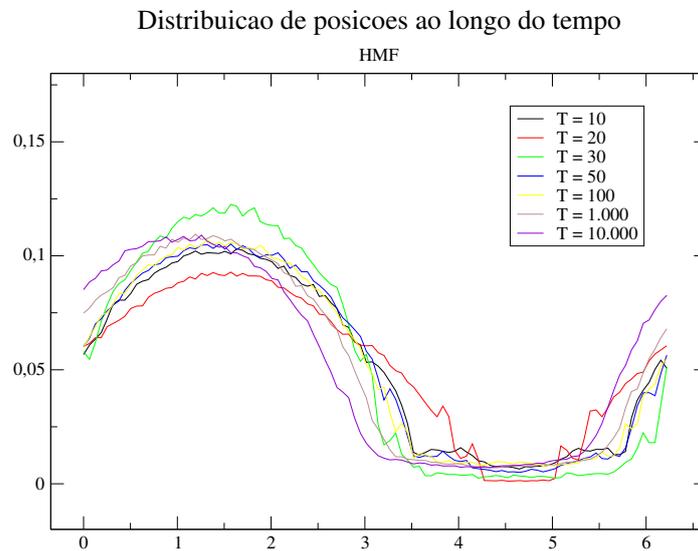


Figura 7.4: Distribuição de posições ao longo do tempo. $N = 1.000.000$ com passo de tempo $\Delta t = 0.5$. O sistema inicialmente gerado com $\theta_0 = 2.0$ e $p_0 = 0.0$ (sistema frio), para um tempo final de 10.

A figura 7.1 mostra de maneira mais clara os resultados anteriores da distribuição de partículas sobre o espaço de fase, exibindo um número maior de partículas mais massivas sobre a estrutura do *core*, enquanto que no *halo* temos uma concentração de partículas menos massivas.

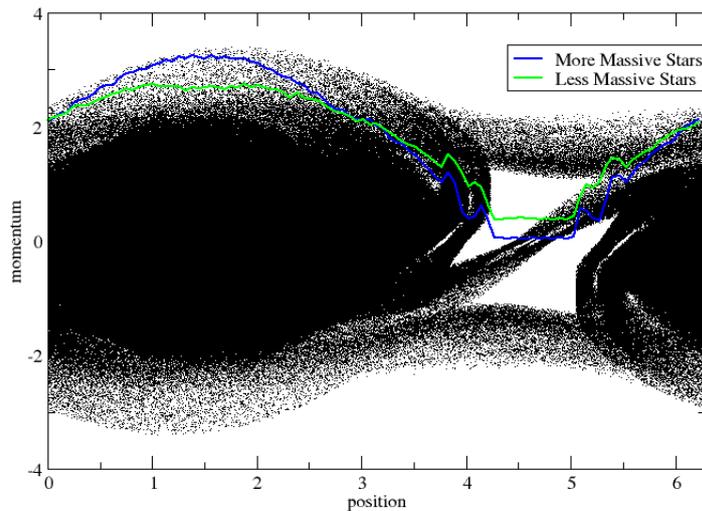


Figura 7.5: Sobreposição do espaço de fase para um tempo final $t_f = 10$ e das distribuições de partículas. $N = 100,000$.

A diferença entre as distribuições para a mesma região do espaço de fase, mas para diferentes intervalos de massa, demonstram claramente a presença da segregação de massa. Vale notar que a segregação de massas surge naturalmente ao longo da dinâmica do sistema, de forma que podemos concluir que o fenômeno em si é inerente do sistema.

Lembrando que estes resultados tem como objetivo mostrar a viabilidade de modelos como o HMF de descreverem o fenômeno de segregação de massas e que um estudo mais detalhado e com resultados mais quantitativos estão previstos nas perspectivas desta tese, além da extensão para o MAAG e o modelo de folhas autogravitantes.

Capítulo 8

Conclusões e Perspectivas

Revisão e Conclusões

Como falado no início da tese, nosso interesse é a descrição de sistemas com interação de longo alcance, e em particular sistema autogravitantes procuramos obter uma melhor compreensão da Teoria Cinética desses sistemas. Um dos pontos chaves foi determinar o escopo de validade da equação de Vlasov nesses sistemas. Com este objetivo fizemos uma revisão da teoria cinética partindo da equação de Liouville Eq. (4.7) apresentada no Capítulo 4 onde apresentamos uma dedução da equação de Vlasov baseada na introdução do fator de cac $1/N$ e de uma expansão em séries de potências de $1/N$. Fizemos uma expansão em série de Fourier da equação de Liouville e então passamos a introduzir uma notação que nos permitisse trabalhar na forma matricial com os termos da série, o que resultou na equação Eq. (4.55), a qual nos permite calcular a contribuição de cada diagrama representando termos da série perturbativa.

Uma vez que estabelecemos a teoria estamos prontos para a abordar o problema proposto no Capítulo 5. Começamos com a determinação de uma Hierarquia BBGKY para partículas autogravitantes não-idênticas. Uma vez tal Hierarquia estabelecida passamos à seleção da categoria correta de diagramas de acordo com sua dependência com o número de partículas $N \gg 1$. Calculamos então as contribuições relevantes para a série para

$\rho_{\mathbf{k}}(\alpha; t)$, que uma vez ressomada resulta na equação de Vlasov Eq.(5.18). Nossa dedução guarda fortes semelhança com a dedução de Balescu [47], embora utilize a dependência dos diferentes diagramas com N , enquanto Balescu utilizou o parâmetro de plasma para o mesmo objetivo. Com isso demos uma nova demonstração de que a equação de Vlasov é a equação cinética natural para sistemas com interação de longo alcance no limite $N \rightarrow \infty$, resultado este já demonstrado anteriormente em um artigo extremamente rebuscado [39].

De maneira a mostrar como diferentes potenciais de interação levam a diferentes velocidades de convergência com o número de partículas para a dinâmica de Vlasov (campo médio), consideramos no Capítulo 6 três diferentes modelos unidimensionais com interação de longo alcance, todos extensivamente estudados na literatura, o modelo HMF, o MAAG e o modelo de folhas autogravitantes.

As simulações para o MAAG mostram que para menores valores do parâmetro de amortecimento ϵ , a convergência das propriedades de dinâmica molecular para a de Vlasov para pequenos valores de ϵ . É um resultado esperado visto que para pequenas distâncias, os efeitos colisionais são mais importantes quando ϵ é menor. Já para o modelo de folhas autogravitantes, a medida que aumentamos o número de partículas N vemos uma concordância cada vez melhor com a dinâmica de Vlasov. A convergência para uma descrição de campo médio é fortemente afetada pela parte de curto alcance da força. Quanto mais forte a torça, mais importante os efeitos colisionais, e menor é o tempo de concordância com a equação de Vlasov para um N finito. Realizamos ainda uma série de simulações a partir de uma distribuição inicial de *waterbag* homogênea até o estado final de equilíbrio termodinâmico onde observamos facilmente que tanto para \mathcal{K}_p , quanto para \mathcal{K}_θ tendem exatamente para a Gaussiana para todos os valores de N utilizados. Isso foi realizado com a finalidade de mostrar que a correlação entre as partículas se tornam pequenas de acordo com o a descrição do campo médio vai tomando conta e tendendo à dinâmica real.

Por fim no Capítulo 7 introduzimos o problema de segregação de massas e mostramos que o mesmo pode ser estudado por meio de modelos

simplificados, como o modelo HFM. Primeiro introduzimos o modelo HMF para partículas de massas diferentes e rescrevemos as suas expressões, tais como, a Hamiltoniana, força e magnetizações. As simulações realizadas (aqui apenas de dinâmica molecular) mostram claramente que as partículas mais pesadas tendem a se concentrar no *core*, enquanto que as menos massivas no *halo*, como já esperado. A importância deste resultado se encontra no fato de que até então os astrofísicos utilizam sistemas mais próximos da realidade nesses estudos, o que faz com que as simulações necessárias sejam extremamente complexas e demoradas. Nesse contexto nosso estudo detalhado mostra que a segregação de massas é um fenômeno da dinâmica, inerente ao sistema.

8.1 Perspectivas

Apresentamos aqui os problemas que serão trabalhados que dão continuidade aos resultados apresentados na presente tese.

Segregação de Massas

O trabalho sobre segregação de massas utilizando os modelos simplificados ainda se encontra em um estágio inicial. Além de continuarmos com o estudo para o modelo HMF, ainda temos os demais modelos: MAAG e Folhas autogravitantes, nos quais esperamos também o aparecimento da segregação de massas.

Equação Cinética de Ordem N^2

Um dos problemas ainda em aberto é a descrição dos estados quasi-estacionários, uma vez que a melhor teoria que se tem, a de Lynden-Bell, mas que é falha na descrição dos QSS, $f_{LB} \neq f_{QSS}$. Uma alternativa viável para tal problema, já inicialmente abordado pelo Prof. T. Marciano em $1/N$ para o estudo da dinâmica colisional.

A diferença entre a abordagem proposta aqui, a utilizada em toda a tese, e a do prof. T. Marciano é que ao utilizar a abordagem apresentada em [46] ao invés da mais antiga, [47], é que na primeira já partimos dos diagramas com as correlações explícitas, o que facilita a dedução da equação cinética, mas no processo a solução da equação não é obtida, o que faz com se tenha a necessidade de uma técnica de solução de equações integro-diferenciais. Enquanto isso, ao usarmos a técnica mais antiga a solução já surge no processo de dedução da equação, embora requeira a ressonância, nada simples, de uma série perturbativa.

A abordagem para a dedução de tal equação é a mesma apresentada ao longo desta tese. A questão agora é que precisamos que a equação tenha uma dependência em $1/N$ ou $1/N^2$ (estados homogêneos em 1D).

Os tipos de diagramas a serem considerados estão apresentados na figura abaixo. Vale notar que temos uma nova classe de diagramas, os *ciclos*,

conhecidos como diagramas diagonais. Tais diagramas são distintos dos demais pelo fato de que os estados iniciais e finais devem ser idênticos.

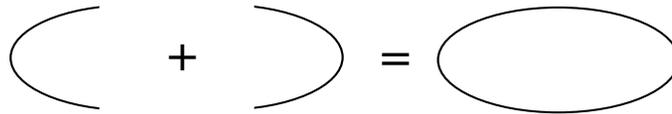


Figura 8.1: Construção do diagrama tipo anel.

Aqui serão introduzidos dos diagramas do tipo anel, que na sua forma mais simples nada mais do que um vértice de criação uniforme junto com um vértice de destruição uniforme. A equação cinética em sua forma mais geral é dada por:

$$\partial_t \rho(p; t) = \int (dp)^N \mathcal{R} \rho(p; 0)$$

onde \mathcal{R} é o resolvente vindo da soma dos diagramas selecionados.

Apêndice A

Hierarquia BBGKY

Seguiremos aqui a dedução da Hierarquia BBGKY como feito em [46]. Começamos considerando um sistema clássico formado por N partículas interagentes confinadas em um volume V . Assumimos ainda que o sistema possui uma Hamiltoniana na forma

$$H = \sum_{j=1}^N H^0(x_j) + \sum_{j < k=1}^N V(x_j, x_k) \quad (\text{A.1})$$

onde H^0 é a parte livre, enquanto $V_{jk} \equiv V(x_j, x_k)$ o termo de interação. A evolução dinâmica do sistema é dada de forma exata pela equação de Liouville:

$$\partial_t F = \sum_{j=1}^N \mathcal{L}_j^0 F + \sum_{j < n}^N \mathcal{L}'_{jn} F, \quad (\text{A.2})$$

sendo $F = F(x_1 \dots x_N)$ a distribuição do espaço de fase. Lembrando que a conservação de partículas requer a condição de normalização

$$\int dx_1 \dots dx_N F(x_1 \dots x_N; t) = 1, \quad (\text{A.3})$$

tomando a derivada ao longo do tempo

$$\partial_t \int dx_1 \dots dx_N F(x_1 \dots x_N; t) = 0. \quad (\text{A.4})$$

Substituindo a Eq. (A.1) na Eq. (A.4), obtemos:

$$\int dx_1 \dots dx_N \left(\sum_{j=1}^N \mathcal{L}_j^0 + \sum_{j < n}^N \mathcal{L}'_{jn} \right) F = 0, \quad (\text{A.5})$$

que deve ser válida independente do número de partículas. Dessa forma, cada termos da Eq. A.5) deve ser nulo independente do outro

$$\int dx_1 \dots dx_N \sum_{j=1}^N \mathcal{L}_j^0 F = 0 \quad (\text{A.6})$$

$$\int dx_1 \dots dx_N \sum_{j < n}^N \mathcal{L}'_{jn} F = 0. \quad (\text{A.7})$$

De maneira a deduzir uma equação de evolução apropriada para a função distribuição reduzida à s partículas

$$f_s(x_1 \dots x_s) = \frac{N!}{(N-s)!} \int dx_{s+1} \dots dx_N F, \quad (\text{A.8})$$

precisamos integrar a Eq. (A.1) sobre as partículas $s+1 \dots N$:

$$\begin{aligned} \partial_t f_s(x_1 \dots x_s) &= \frac{N!}{(N-s)!} \int dx_{s+1} \dots dx_N F \\ &= \frac{N!}{(N-s)!} \int dx_{s+1} \dots dx_N \left(\sum_{j=1}^N \mathcal{L}_j^0 + \sum_{j < n}^N \mathcal{L}'_{jn} \right) F. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Podemos separar o somatório contendo a parte livre do Liouvilliano \mathcal{L}^0 da seguinte maneira:

$$\sum_{j=1}^N \mathcal{L}_j^0 = \sum_{j=1}^s \mathcal{L}_j^0 + \sum_{j=s+1}^N \mathcal{L}_j^0. \quad (\text{A.10})$$

Da equação acima podemos tirar a seguinte conclusão: se $j \in (1, \dots, s)$, o operador \mathcal{L}_j^0 não será afetado pela integração, já que partimos de dx_{s+1} . Por outro lado, se $j \in (s+1, \dots, N)$, segue pela Eq. (A.6) que tais integrais serão nulas. Dessa forma, segue:

$$\sum_{j=1}^N \frac{N!}{(N-s)!} \int dx_{s+1} \dots dx_N F = \sum_{j=1}^s \mathcal{L}_j^0 f_s(x_1, \dots, x_s). \quad (\text{A.11})$$

Vamos agora tratar da parte contendo o \mathcal{L}'_{jn} da Eq. (A.9). Aqui podemos proceder com a mesma análise anterior, mas nesse caso, temos três possibilidades:

1. $j, n \in (1, \dots, s)$: aqui o \mathcal{L}'_{jn} pode ser colocado fora da integral e obtemos

$$\sum_{j < n=1}^s \mathcal{L}'_{jn} f_s(x_1, \dots, x_s); \quad (\text{A.12})$$

2. $j, n \in (s+1, \dots, N)$: segue pela Eq. (A.6) que tais integrais serão nulas;
3. $j \in (1, \dots, s)$ e $n(> j) \in (s+1, \dots, N)$. Fazendo uma integração sobre x_n e devido à simetria da função F , podemos escrever:

$$\begin{aligned} & \frac{N!}{(N-s)!} \int dx_{s+1} \dots dx_N \sum_{j=1}^s \sum_{n=s+1}^N \mathcal{L}'_{jn} F(x_1 \dots x_N) \\ &= \sum_{j=1}^s \int dx_{s+1} \mathcal{L}'_{j,s+1} f_{s+1}(x_1 \dots x_{s+1}). \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Juntando todos estes resultados, obtemos a hierarquia:

$$\partial_t f_0 = 0; \quad (\text{A.14})$$

$$\partial_t f_1(x_1) = \mathcal{L}_1^0 f_1(x_1) + \int dx_2 \mathcal{L}'_{12} f_2(x_1, x_2) \quad (\text{A.15})$$

$$\begin{aligned} \partial_t f_s(x_1 \dots x_s) &= \left(\sum_{j=1}^s \mathcal{L}_j^0 + \sum_{j < n=1}^s \mathcal{L}'_{jn} \right) f_s(x_1 \dots x_s) \\ &+ \sum_{j=1}^s \int dx_{s+1} \mathcal{L}'_{j,s+1} f_{s+1}(x_1 \dots x_{s+1}) \quad s \leq 2; \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

As Eqs. (A.14) - (A.16) formam um conjunto de N equações para a função distribuição reduzida conhecida como hierarquia BBGKY. A Eq. (A.16) deixa muito claro a estrutura da hierarquia: a determinação da função para s partículas depende do conhecimento da função distribuição de uma ordem maior $s+1$.

Apêndice B

Métodos Numéricos

Aqui apresentaremos uma seqüência de simulações numéricas para os três *toy models* introduzidos nos capítulos 02 e 07, além da solução numérica da equação de Vlasov que obtivemos. Diversas simulações numéricas foram realizadas com a finalidade de confirmar os resultados analíticos obtidos. Boa parte delas foi realizada utilizando paralelização de processos em placas de gráficas (GPU) por meio da linguagem de programação CUDA. Isto tanto para as dinâmicas molecular [52, 53] quanto a equação de Vlasov [54]. O integrador simplético utilizado nas simulações foi o Yoshida de quarta ordem [51]. O objetivo deste Apêndice é apresentar de maneira simplificada como as simulações foram realizadas.

B.1 Dinâmica Molecular

Nas simulações uma das técnicas utilizadas foi a dinâmica molecular. Aqui passamos a descrever a estrutura básica de uma simulação de dinâmica molecular afim de deixar claro como as nossas simulações foram realizadas. No Algoritmo 1 apresentamos esta estrutura básica, composta por três partes distintas

Algoritmo 1: Estrutura de uma programa de dinâmica molecular

```

begin
  | CondiçõesIniciais();
  | GrandezasIniciais();
  | LoopDeIntegração;
end

```

onde

- CondiçõesIniciais() → Gera as posições e momentos iniciais do sistema, distribuição de waterbag, por exemplo;
- GrandezasIniciais() → Calcula as grandezas iniciais do sistema, tais como energias cinética e potencial, energia total, momento inicial, etc...;
- LoopDeIntegração → Responsável pela evolução temporal do sistema. A cada passo de tempo as grandezas de interesse são recalculadas.

Em se tratando de um sistema físico formado por N partículas, a função CondiçõesIniciais() gera todo o espaço de fase, Γ em $t = 0$,

$$\{q_i(0), p_i(0)\}_{i=1}^N \in \Gamma.$$

Sendo rand() um gerador de números pseudo-aleatórios, uniformes no intervalo $[0, 1]$, o algoritmo 2 mostra a estrutura da função CondiçõesIniciais(), no caso de se querer gerar um espaço de fase inicial formado por N partículas de mesma massa, $m = 1$, com posições entre 0 e x_0 e velocidades entre 0 e v_0 .

Algoritmo 2: CondiçõesIniciais()

```

begin
1 | for  $i = 0$  to  $N$  do
  |   |  $x_i \leftarrow x_0 \cdot \text{rand}()$ ;
  |   |  $v_i \leftarrow v_0 \cdot \text{rand}()$ ;
  | end for
end

```

Algoritmo 3: LoopDeIntegração.

```
begin
1 | while tempo < tempoFinal do
  |   PassoDeTempo();
  |   CálculoDasGrandezasDeInteresse();
  |   tempo ← tempo + dt
  | end while
end
```

É justamente dentro da função `PassoDeTempo()` que está a integração numérica. Existem diversos tipos de integradores numéricos e de diversas ordens de aproximação, sendo um dos mais simples o integrador numérico de Euler [57], passando pelo de Runge-Kutta e por fim os integradores simpléticos, que são os que preservam a energia total do sistema, sendo por isso os mais indicados para simulações de sistemas Hamiltonianos. Nas nossas simulações foi utilizado o integrador simplético de Yoshida [51] de quarta ordem apresentado no pseudocódigo abaixo.

Algoritmo 4: PassoDeTempo() : Yoshida de 4 Ordem

```

B0 ← 0.675603595979828813;
B1 ← -0.175603595979828813;
D0 ← 1.35120719195965763;
D1 ← -1.70241438391931525;
begin
  for i = 0 to N do
    | p_i ← p_i + B0 * h * f_i;
    | r_i ← r_i + D0 * h * p_i;
  end for
  CalculoDaForca();
  for i = 0 to N do
    | p_i ← p_i + B1 * h * f_i;
    | r_i ← r_i + D1 * h * p_i;
  end for
  CalculoDaForca();
  for i = 0 to N do
    | p_i ← p_i + B1 * h * f_i;
    | r_i ← r_i + D0 * h * p_i;
  end for
  CalculoDaForca();
  for i = 0 to N do
    | p_i ← p_i + B0 * h * f_i;
  end for
end

```

A função `CalculoDaForca()` irá depender do sistema que está sendo integrado. Os valores de $B0$, $B1$, $D0$ e $D1$ são fornecidos pelo integrador simplético e são calculados analiticamente [51].

B.2 Solução Numérica da Equação de Vlasov

Descreveremos aqui uma implementação [54] de um método de solução semi-Lagrangiano para a equação de Vlasov em sistemas com interação autogravitante unidimensionais. Aqui a função distribuição é representada em uma grade numérica e um algoritmo de divisão de tempos é utilizado para evoluir a função calculando as curvas características. A f_1 é representada em uma grade numérica no espaço de fase de uma partícula como $f(x_j, p_j, t)$ onde x_j e p_j são as coordenadas posição e o momento na grade em um domínio finito $x \in [x_{min}, x_{max}]$ e $p \in [p_{min}, p_{max}]$. O algoritmo possui 4 passos:

1. Evolução temporal para trás de f na direção do espaço por um passo de tempo $\Delta t/2$ com momento constante;
2. Cálculo da força de campo médio;
3. Evolução temporal para trás na direção do momento de um passo de tempo Δt usando a força de campo médio calculada no item 2;
4. repetimos o passo 1.

Este algoritmo está resumido na forma de pseudocódigo no Algoritmo 5.

Algoritmo 5: Evolução temporal da função distribuição

begin

$$\left| \begin{array}{l} f^{(I)}(x, p) \leftarrow f(x - p\Delta p/2, p, t) \\ F^{(I)}(x) \leftarrow - \int \partial_x v(x - x') f^{(I)}(x', p') dx' dv' \\ f^{(II)}(x, p) \leftarrow f(x - p - F^{(I)}(x)\Delta t, t) \\ f(x, p, t + \Delta t) \leftarrow f^{(II)}(x - p\Delta p/2, p, t) \end{array} \right.$$

end

Os valores intermediários $f^{(I)}$ e $f^{(II)}$ e as funções distribuição nos passos (1), (3) e (4) nos pontos da grade numérica precisam ser obtidas dos valores conhecidos nos passos anteriores com um método de interpolação.

Referências Bibliográficas

- [1] M. Antoni and S. Ruffo, Phys. Rev. E **52**, 2361 (1995).
- [2] Y. Sota, O. Iguchi, M. Morikawa, T. Tatekawa and K. I. Maeda, Phys. Rev. E **64** (2001) 056133.
- [3] T. Tatekawa, F. Bouchet, T. Dauxois and S. Ruffo, Phys. Rev. E **71** (2005) 056111.
- [4] K. R. Yawn and B. N. Miller, Phys. Rev. E **68**, 056120 (2003).
- [5] Y. Y. Yamaguchi, Phys. Rev. E **78**, 041114 (2008).
- [6] Y. Yoshiyuki, Y. Yamaguchi, J. Barré, F. Bouchet, T. Dauxous and S. Ruffo, Physica A **337**, 36 (2004).
- [7] A. Campa, A. Giansanti and G. Morelli, Phys. Rev. E **76**, 041117 (2007).
- [8] A. Campa, P. H. Chavanis, A. Giansanti and G. Morelli, Phys. Rev. E **78**, 040102(R) (2008).
- [9] M. Joyce and T. Worrakitpoonpon, J. Stat. Mech. P10012 (2010).
- [10] S. Gupta and D. Mukamel, J. Stat. Mech. P08026 (2010).
- [11] S. Gupta and D. Mukamel, J. Stat. Mech. P03015 (2011).
- [12] S. Gupta and D. Mukamel, Phys. Rev. Lett. **105** (2010) 040602.
- [13] D. Lynden-Bell, Mon. Not. R. Astr. Soc. **136**, 101 (1967).
- [14] T. Padmanabhan, Phys. Rep. **188** (1990) 285.

- [15] Chandrasenkar, Principles of Stellar Dynamics (1942)
- [16] P. H. Chavanis, J. Stat. Mech. P05019 (2010).
- [17] P.-H. Chavanis, Physica A **361**, 55 (2006).
- [18] P. H. Chavanis, Physica A **387** (2008) 787.
- [19] P. H. Chavanis, Eur. Phys. J. Plus **127**, 19 (2012).
- [20] P. H. Chavanis, cond-mat.stat-mech: 1303.0998.
- [21] P. H. Chavanis, cond-mat.stat-mech: 1303.1004.
- [22] D. Ruelle, *Statistical Mechanics - Rigorous Results*, 2nd Ed, Imperial College Press (2007).
- [23] E. Schrodinger, *Statistical Thermodynamics*, 2nd Ed, Dover (Cambridge, 1989)
- [24] Campa, A., Dauxois T., and Ruffo, S.: Statistical mechanics and dynamics of solvable models with long range interactions, Phys. Rep. **470**, 57-159 (2009).
- [25] *Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long-Range Interactions*, T. Dauxois, S. Ruffo, E. Arimondo and M. Wilkens (Eds.), Springer (Berlin, 2002)
- [26] *Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long-Range Interactions: Theory and Experiments*, A. Campa, A. Giansanti, G. Morigi and F. S. Labini (Eds.), AIP Conf. Proceedings Vol. **970** (2008).
- [27] *Long-Range Interacting Systems*, Les Houches 2008, Session XC, T. Dauxois, S. Ruffo and L. F. Cugliandolo Eds, Oxford Univ. Press (Oxford, 2010).
- [28] T. M. Rocha Filho, A. Figueiredo, M. A. Amato, A. .E. Santana and J. R. Steiner, cond-mat.stat-mech:1305.2903.

- [29] T. M. Rocha Filho, A. Figueiredo and M. A. Amato, *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 190601.
- [30] A. Figueiredo, T. M. Rocha Filho and M. A. Amato, *Europhys. Lett.* **83** (2008) 30011.
- [31] T. N. Teles, Y. Levin, R. Pakter and F. B. Rizzato, *J. Stat. Mech.* (2010) P05007.
- [32] Y. Levin, R. Pakter and T. N. Teles, *Phys. Rev. Lett.* **100** (2008) 40604.
- [33] F. B. Rizzato, R. Pakter and Y. Levin, *Phys. Rev. E* **80** (2009) 021109.
- [34] B. E. Turkington, “Statistical mechanics of two-dimensional and quasi-geostrophic flows”, in [27].
- [35] J. Barré, T. Dauxois, G. De Ninno, D. Fanelli and S. Ruffo, *Phys. Rev. E* **69** (2004) 045501(R).
- [36] P. de Buyl, D. Fanelli, R. Bachelard and G. De Ninno, *Phys. Rev. S. Top. Acc. Beans* **12** (2009) 060704.
- [37] T. N. Teles, Y. Levin, R. Pakter and F. B. Rizzato, *J. Stat. Mech.* (2010) P05007.
- [38] R. L. Liboff, *Kinetic Theory: Classical, Quantum and Relativistic Descriptions*, 3rd Ed, Springer (New York, 2003).
- [39] W. Braun and K. Hepp, *Commun. Math. Phys.* **56**, 125 (1977).
- [40] M. M. Sano, *J. Phys. Soc. Japan* **81** (2012) 024008.
- [41] F. Bouchet and T. Dauxois, *Phys. Rev. E* **72** (2005) 5103.
- [42] Y. Y. Yamaguchi, J. Barré, F. Bouchet, T. Dauxois and S. Ruffo, *Physica A* **337**, 36 (2004).
- [43] F. Andrews, *Acad. Roy. Belg. Bull. Classe Sci.*, **46**, 475 (1960).

- [44] A. Sokolov and D. Ivanenko, *Quantum Theory of Fields (In Russian)*, Gos. Izdat. Techn. Teoret. Liter. Moscow, 1952
- [45] J. Dawson, *Phys. Fluids* **7** (1964) 419.
- [46] R. Balescu, *Statistical Mechanics - Matter out of Equilibrium*, Imperial College Press (London, 1997).
- [47] R. Balescu, *Statistical Dynamics of Charged Particles*, Interscience (London, 1963).
- [48] I. Prigogine, *Non-Equilibrium Statistical Mechanics*, Interscience (New York, 1963).
- [49] R. Brout and I. Prigogine, *Physica*, **22**, 621 (1956).
- [50] D. E. Knuth, *The Art of Computer Programming*, Vol. 2, Addison Wesley (Reading, 1998).
- [51] H. Yoshida, *Phys. Lett. A* **150** (1990) 262.
- [52] T. M. Rocha Filho, physics.comp-ph:1212.0621.
- [53] D. C. Rapaport, *The Art of Molecular Dynamics Simulation* 2nd Ed, Cambridge University Press (Cambridge, 2004);
- [54] T. M. Rocha Filho, *Comp. Phys. Comm.* **184** (2013) 34.
- [55] M. K. H. Kiessling, *J. Stat. Phys.* **55** (1989) 203.
- [56] B. Marcos, cond-mat.stat-mech:1212.0959.
- [57] E. Hairer, C. Lubich, G. Wanner, *Geometric Numerical Integration - Structure-Preserving, Algorithms for Ordinary Differential Equations*, Springer (2010).
- [58] Alan. P. Lightman and Stuart. L. Shapiro, *Rev. Mod. Phys.* **50**, 437–481 (1978)
- [59] R. J. Allison, et al, *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, **395**, 1449 - 1454 (2009).

- [60] R. J. Allison, *et al*, The Astrophysical Journal, 700:L99-L103 (2009).
- [61] C. Olczak, R. Spurzem and Th. Henning, Astronomy and Astrophysics Volume 532, **A119**, 11 (2011).
- [62] Ademir E. de Santana, *Mecânica Ondulatória no Espaço de Fase: Estrutura Algébrica e Aplicações a Sistemas Eletrônicos*, Tese de Doutorado, USP (1988).