

Bruno Vieira Ribeiro

*Abordagens Dinâmica e Estocástica
na Descrição de Processos Físicos
na Física de Plasmas.*

Brasília

Outubro de 2014

Bruno Vieira Ribeiro

***Abordagens Dinâmica e Estocástica
na Descrição de Processos Físicos
na Física de Plasmas.***

Tese de Doutorado apresentada ao Instituto de Física da Universidade de Brasília como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Marco A. Amato

Co-orientador: Prof. Dr. Yves Elskens

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
INSTITUTO DE FÍSICA

Brasília

Outubro de 2014

Comentários e Agradecimentos

Em primeiro lugar, agradeço aos meus pais por tudo.

Agradeço a ambos pela vida que me deram, cheia de oportunidades e de muito amor e carinho. Agradeço pela paciência, pela coragem, pelo trabalho duro e pela força em todos os momentos da vida, sempre me ensinando a viver e a lutar para alcançar os meus objetivos. Agradeço muito pelo exemplo de dedicação e de paixão pela vida, sempre priorizando os filhos e a alegria. Sem eles, nenhum dos meus sonhos seria possível. Agradeço, também, à minha irmã pelos muitos anos de diversão e companherismo. Agradeço pelo enorme apoio durante a elaboração desse trabalho.

À minha esposa, Natália, agradeço pelo amor que compartilhamos e pela vida que construímos. Agradeço pela coragem de encarar desafios e por me dar forças para seguir sempre em frente. Pela motivação, pelo carinho e por todas as brincadeiras que te tornam tão única, muito, mas muito obrigado. Pela construção dos nossos sonhos, por sonhar comigo e, principalmente, por ser o meu grande sonho, obrigado.

Ao meu orientador, Marco Amato, obrigado pela paciência durante todos estes anos, pelas inúmeras discussões e por me ensinar a pesquisar. To my co-advisor, Yves Elskens, a huge thank you for the impeccable teachings, for the enormous patience and for sharing the joy of working in such a beautiful field. Merci beaucoup, Yves. A very big thank you to everyone in the PIIM team in Marseille for the help and the very warm welcome.

Aos meus colegas Daniel, Luciano e Paulo, muito obrigado pela diversão e pelo trabalho. Aos três agradeço as muitas contribuições ao longo de toda a minha formação. Um muito obrigado a todos os colegas da física: Carlos, Cíntia, Chris, João, Regina, Márcio, André, José André, Neymar, José, Rodrigo, Fernando e Lydiane, que compartilham a diversão de estudar a Física.

Alberto, Kishor and Diana, thank you for the wonderful friendship and for every moment of fun and silliness (that are still happening...). To the whole Marseille family: Davi, Piotr, Marine, Arnaud, Lénaïc, Cristina, Robert, Ana, Bogdan, Ali, Maya and Brunela, thank you for the great year.

Ao pessoal da EWO, obrigado pela diversão e distração, ambas muito necessárias na parte final do trabalho.

Finalmente, agradeço à CAPES pelo apoio financeiro.

Aos meus pais, Ana e Célio, por me ensinar a sonhar.

À minha esposa, Natália, pelo sonho.

*One of the principal objects of theoretical research is to find the point of view
from which the subject appears in its greatest simplicity.*

W. Gibbs

*It is through science that we prove,
but through intuition that we discover.*

H. Poincaré

We demand rigidly defined areas of doubt and uncertainty!

D. Addams

– ‘Where did you go to?’(…)

– ‘To look ahead.’(…)

– ‘And what brought you back in the nick of time?’

– ‘Looking behind.’

J. R. R. Tolkien

Resumo

Neste trabalho abordamos a descrição de um plasma por meio de uma aproximação dinâmica. Esta aproximação consiste em considerar o sistema como um conjunto de N partículas interagindo de maneira auto-consistente com M ondas.

A derivação das equações que regem a evolução dinâmica do sistema assume um número muito grande, porém finito de partículas. Quando este número tende ao infinito, esperamos que os resultados obtidos sejam os mesmos daqueles obtidos pela abordagem cinética usual de Vlasov. Formalmente, mostra-se que, de fato, no limite $N \rightarrow \infty$, a abordagem cinética comuta com a de Vlasov em um espaço infinito, para uma energia finita do sistema. Para modelar sistemas reais, neste trabalho, tratamos de um sistema no qual a interação entre partículas e ondas acontece em um espaço limitado (de tamanho finito). Com uma definição apropriada das bordas desta região de interação, mostramos, novamente, que a descrição dinâmica converge à cinética no limite $N \rightarrow \infty$.

Com este resultado, consideramos a evolução dinâmica do sistema na presença de um número muito grande de ondas. Neste caso, o mecanismo de sincronização entre as várias velocidades de fase das ondas e a velocidade de uma partícula sujeita a essas, torna o movimento da partícula Browniano. A convergência para este tipo de movimento é mostrada utilizando métodos analíticos e numéricos.

O modelo dinâmico onda-partícula, no caso de uma única onda, se assemelha a um modelo simplificado de N corpos de interação de campo médio: o modelo Hamiltoniano de Campo Médio (HMF). Partindo de uma configuração inicial de feixes monocinéticos no espaço de fases, mostramos que o modelo HMF também gera correções Brownianas nas trajetórias das partículas. No caso de um potencial repulsivo, essas correções são observadas em todas as partículas do sistema. No caso atrativo, por outro lado, apenas um grupo específico de partículas apresenta este comportamento.

Sugerimos, finalmente, um sistema simplificado de interação de partículas carregadas em aproximação de campo médio: o modelo HMF com duas espécies de partículas. Suas propriedades de equilíbrio são calculadas e simulações numéricas de vários regimes dinâmicos são apresentadas para caracterizar o sistema.

Palavras Chave: Hamiltoniana onda-partícula, Descrição de Vlasov, Regime de espectro denso, Correções Brownianas, Hamiltoniano de Campo Médio.

Abstract

In this work we consider the dynamical description of a plasma. This approach consists in considering the system as a set of N particles interacting selfconsistently with M waves.

The derivation of the equations describing this dynamical evolution assumes a large, but finite, number of particles. When this number tends to infinity, we expect the results to match those of the usual kinetic Vlasovian description. Formally, it is shown that, indeed, in the $N \rightarrow \infty$ limit, the kinetic approach commutes with the dynamical one for infinite systems, for finite energies. To model more realistic systems, we consider a system in which interactions between waves and particles occur only in a closed (of finite size) space. With a proper definition of the borders of this interaction region, we show, once more, that the dynamical description converges to the kinetic one in the limit $N \rightarrow \infty$.

With these results, we consider the dynamical evolution of the system in the presence of a large number of waves. In this case, the synchronization mechanism between the various phase velocities of the waves and that of a particle subjected to them, makes the particle motion Brownian. The convergence to this motion is shown using analytical and numerical methods.

The wave-particle model, in the single wave case, is similar to a well known simplified N -body model for mean-field interactions: the Hamiltonian Mean Field (HMF) model. Starting from an initial configuration of particles in monokinetic beams in phase space, we show the HMF model to, also, generate Brownian corrections to particle motion. In the case of a repulsive potential, these corrections happen for every particle in the system. In the attractive case, however, only some dynamically separated particles suffer this kind of corrections.

We suggest, finally, a simplified system of charged particles interacting in a mean-field approximation: the HMF model with two species of particles. Its equilibrium properties are calculated and numerical simulations of various dynamical regimes are presented to characterize the system.

Keywords: Wave-particle Hamiltonian, Vlasov description, dense spectrum regime, Brownian corrections, Hamiltonian Mean Field.

Sumário

Lista de Figuras

Lista de símbolos

1	Introdução à física de plasmas - Definições e Descrições do sistema	p. 14
1.1	Características gerais dos plasmas	p. 14
1.1.1	Comportamento Coletivo	p. 16
1.1.2	Quase-neutralidade (<i>Neutralidade Macroscópica</i>)	p. 17
1.1.3	Critérios para o Plasma	p. 20
1.2	Propagação de ondas em plasmas	p. 21
1.2.1	Ondas eletrônicas - correções térmicas	p. 25
1.3	Descrição cinética	p. 26
1.4	Descrição dinâmica	p. 28
1.5	Estrutura da tese	p. 31
2	Limite cinético da descrição dinâmica de N-corpos	p. 34
2.1	Introdução e breve revisão teórica	p. 34
2.2	Objetivos	p. 37
2.2.1	Estratégia	p. 38
2.3	Resultados	p. 38
2.3.1	Interação partícula-partícula em sistemas de d dimensões	p. 38
2.3.2	Campo magnético externo	p. 45

2.3.3	Interação onda-partícula e partícula-partícula em sistemas unidimensionais	p. 48
2.3.4	Demonstração do Teorema	p. 53
3	Limite de espectro denso - Abordagem estocástica	p. 63
3.1	Equações de movimento	p. 64
3.2	Existência e Unicidade de Soluções	p. 65
3.3	Convergência numérica	p. 70
4	Dinâmica do modelo HMF	p. 73
4.1	Introdução ao modelo HMF	p. 73
4.1.1	Relação com o modelo onda-partícula	p. 78
4.2	Análise da dinâmica	p. 79
4.3	Caso repulsivo ($V_1 < 0$)	p. 79
4.3.1	Limite $N \rightarrow \infty$	p. 82
4.4	Caso repulsivo - Abordagem de Picard	p. 83
4.4.1	Comprovação numérica	p. 86
4.5	Caso atrativo ($V_1 > 0$)	p. 89
5	Modelo HMF com duas espécies	p. 94
5.1	Caracterização dinâmica do sistema	p. 94
5.2	Equilíbrio	p. 95
5.3	Resultados Numéricos	p. 99
5.3.1	Regime de baixas energias	p. 101
5.3.2	Modelo de interação invertida	p. 102
6	Conclusões e Perspectivas	p. 104
	Apêndice A – A equação de Vlasov	p. 106

A.1	Equação cinética	p. 106
A.2	Limite de Vlasov	p. 108
Apêndice B – Teoria das equações diferenciais ordinárias		p. 109
B.1	Propriedades básicas	p. 109
B.2	Teorema da unicidade	p. 111
B.3	Teorema da existência	p. 112
B.4	Observações	p. 117
Apêndice C – Equações diferenciais estocásticas		p. 118
C.1	Definições matemáticas e estatísticas preliminares	p. 118
C.2	Equações diferenciais estocásticas	p. 120
C.3	Integral de Itô	p. 125
Apêndice D – Limite de Ornstein-Uhlenbeck para o processo de velocidade de um sistema de N-corpos interagindo estocasticamente		p. 129
D.1	Introdução	p. 129
D.2	Resumo e estratégia	p. 130
D.3	Difusão em uma esfera	p. 131
D.4	Convergência ao processo de Ornstein-Uhlenbeck	p. 133
D.5	Demonstração do teorema D.4.1	p. 134
D.6	Resultados numéricos	p. 136
D.7	Movimento de d partículas	p. 137
D.8	O modelo com conservação de energia e momento	p. 138
D.9	Conclusões	p. 140
Referências Bibliográficas		p. 141

Lista de Figuras

1.1	Longo alcance das forças Coulombianas em plasmas.	p. 16
1.2	Gráfico ilustrando a divisão entre partículas rápidas (cauda) e lentas (bulk). . .	p. 30
2.1	Função R definindo a região de interação.	p. 49
2.2	Trajetórias no espaço (x, v) . O intervalo $[0, L]$ corresponde ao espaço Ω	p. 52
3.1	(a) Posição em função do tempo para o pêndulo; (b) Velocidade em função do tempo. Em ambos os gráficos, as condições iniciais $(q_0, p_0) = (0, 1)$. ndt indica o número de passos do integrador e npic é o número de iterações de Picard.	p. 71
3.2	Velocidade em função do tempo para a solução de (3.2.34). O passo de tempo do integrador foi escolhido como sendo $h = 1/(20M)$ para assegurar que o sistema não varie bruscamente em um passo, dado que $\omega_{m,n} \leq M + 1$	p. 71
3.3	Velocidade em função do tempo para a solução de (3.2.34). O passo de tempo do integrador foi escolhido como sendo $h = 1/(2M)$	p. 72
3.4	Evolução do quadrado da distância (3.2.37) entre iterações de f_1 e f_2 em escala logarítmica em função do número da iteração para vários valores de α . Para esta plotagem, $\eta = \sqrt{2}$ e $T = 6\pi$	p. 72
4.1	Representação da posição no espaço real das partículas do modelo XY HMF. (a) Estado de baixa energia do caso $K = -1$. (b) Estado de baixa energia do caso $K = 1$. Representação de $N = 1000$ partículas.	p. 75
4.2	(a): Retrato de fases do sistema no estado de equilíbrio quasi-estacionário. A linha contínua representa a separatriz instantânea. (b): Energia individual de cada partícula em função de sua posição angular no anel. A linha contínua representa a energia da separatriz. Note que o movimento é dominado pela energia potencial definida pelo segundo termo da equação (4.1.9). As figuras são geradas por uma simulação de dinâmica molecular com $N = 10^4$ e $U \approx 0,3$	p. 77

- 4.3 (a): Retrato de fases do sistema no estado de equilíbrio quasi-estacionário. A linha contínua representa a separatriz instantânea. (b): Energia individual de cada partícula em função de sua posição angular no anel. A linha contínua representa a energia da separatriz. Note que o movimento das PAE define um espectro de energia aproximadamente contínuo acima da linha $e_i = E_s$. As figuras são geradas por uma simulação de dinâmica molecular com $N = 10^4$ e $U \approx 0,5$ p. 77
- 4.4 Evolução temporal do parâmetro de ordem M para o (a) CSC e para o (b) CST. Em ambas as figuras vemos a existência de uma relaxação violenta para tempos curtos, seguida de um estado de longa duração com magnetização alta e poucas flutuações. Simulação realizada com $N = 10^4$ p. 78
- 4.5 Distribuição inicial das partículas em feixes monocinéticos no espaço (q, p) . Distribuição de (a): 10 partículas, (b) 20 partículas, (c) 100 partículas e (d) 1000 partículas. Podemos ver como a distribuição se aproxima de uma “waterbag”. p. 81
- 4.6 Retratos de fase: (a) representa o estado inicial do sistema e (b) o estado em um tempo de simulação $t = 200$. Nota-se que não há transição de fase neste sistema, i.e. , o sistema permanece em um estado homogêneo. Os gráficos são feitos com 10^5 partículas. p. 87
- 4.7 Trajetórias de 6 diferentes partículas no espaço das velocidades. O número de partículas simuladas é igual a 10^4 e as condições iniciais são dadas por (4.4.21). p. 87
- 4.8 Evolução de $S^2(t)$ para um sistema de $n = 10^6$ partículas. Usamos uma amostragem de 10^5 partículas, um tempo total de simulação igual a 500 com um passo de tempo $dt = 0.1$ p. 88
- 4.9 Momentos de $P_j(t)$. Usamos uma amostragem de 10^5 partículas, um tempo total de simulação igual a 500 com um passo de tempo $dt = 0.1$ p. 89
- 4.10 Retratos de fase: (a) representa o estado inicial do sistema e (b) o estado em um tempo de simulação $t = 500$. Nota-se a formação de uma estrutura aglomerada no espaço de fases. Os gráficos são feitos com 10^5 partículas. . . p. 89
- 4.11 (a): Densidade n_d em função das posições das respectivas partículas. (b): Retrato de fases do sistema distinguindo as partículas do aglomerado (em preto) das demais (em vermelho). Gráficos elaborados para um sistema de $N = 10^4$ partículas. p. 90

4.12	(a): Trajetórias de 6 diferentes partículas no espaço das velocidades. O número de partículas simuladas é igual a 10^4 e as condições iniciais são dadas por (4.4.21). (b): Evolução da variância empírica $S^2(t)$ para um sistema de $N = 10^6$ partículas. Usamos uma amostragem de 10^5 partículas, tempo de simulação $t = 500$ com um passo de tempo $dt = 0.1$	p. 91
4.13	Evolução da variância empírica das partículas fora do aglomerado. O gráfico mostra a evolução para dois tamanhos diferentes do sistema.	p. 91
4.14	Evolução temporal (a) da velocidade e da posição (b) de uma típica partícula próxima à separatriz. Notamos que, antes da inversão (travessia da separatriz caracterizada pela mudança no sinal da velocidade), o movimento da partícula pode ser aproximado pelo movimento balístico.	p. 92
4.15	Evolução temporal da variância empírica das PAE para um sistema de $N = 10^5$. Sistema com condição inicial do tipo <i>waterbag</i> com (a) $p_0 = 0$ e (b) $p_0 = 1.0$	p. 92
4.16	Evolução temporal da variância empírica das PAE para um sistema de $N = 10^5$. Sistema com condição inicial do tipo <i>waterbag</i> com $p_0 = 1.0$	p. 93
4.17	Evolução temporal do número de PAE para um sistema de $N = 10^5$. Sistema com condição inicial do tipo <i>waterbag</i> com (a) $p_0 = 0$ e (b) $p_0 = 1.0$	p. 93
5.1	Retrato de fases do sistema dado por (5.1.1). Por simplicidade, usamos $N_1 = N_2$ e $M = m = 1$	p. 100
5.2	Construção geométrica da solução da equação (5.3.1).	p. 100
5.3	Retrato de fases do sistema a baixas energias para diferentes tempos computacionais. Partículas de diferentes espécies são ilustradas por diferentes cores no retrato de fases. Note a escala de variação de p , da ordem de 10^{-2}	p. 101
5.4	Construção geométrica da solução da equação (5.3.4).	p. 102
5.5	Retrato de fases do sistema caracterizado pela hamiltoniana (5.3.3) no estado de equilíbrio quasi-estacionário.	p. 103
C.1	Distribuição Gaussiana para diversos valores da variância $V[X]$	p. 120
C.2	Exemplo de vários movimentos Brownianos padrão (processo de Wiener).	p. 122
D.1	Trajetórias, no espaço das velocidades. (a) mostra a evolução de um sistema de uma partícula, i. e. $D = 3$; a figura (b) possui $D = 9$; (c) $D = 30$ e (d) $D = 30000$. Todos os gráficos são feitos com 10^4 passos de tempo, $v_0 = 0$ e possuem $c_1 = 1$	p. 136

D.2 Trajetórias, no espaço das velocidades. Ambos os gráficos são feitos com 10^4 passos de tempo, $v_0 = 0$ e $D = 30$. Vemos que (a) mostra uma melhor aproximação de V_1 por V'_1 p. 137

Lista de símbolos

n_i	Densidade de partículas do tipo i
n_{i0}	Densidade de equilíbrio das partículas do tipo i
e_i	Carga das partículas do tipo i
k_B	Constante de Boltzmann
T_{ei}	Temperatura das partículas do tipo i
λ_D	Comprimento de Debye
N_D	Número de partículas na esfera de Debye
ω_p	Frequência natural do plasma
τ	Tempo médio entre colisões no plasma
g	Parâmetro de plasma
F_α	Função de distribuição das partículas do tipo α
ρ_α	Densidade de carga das partículas do tipo α
\mathbf{j}_α	Densidade de corrente das partículas do tipo α
ϵ_0	Permissividade elétrica do vácuo
μ_0	Permissividade magnética do vácuo
\mathbf{E}	Campo elétrico
\mathbf{B}	Campo magnético
H_{ac}	Hamiltoniana de interação partícula-onda
H_{r0}	Energia da r -ésima onda livre
I_r	Ação associada à r -ésima onda

N_C	Número de partículas na cauda da distribuição
M	Número de ondas auto-consistentes no sistema onda-partícula
P_{ac}	Momento total do sistema onda-partícula
d_{bL}	Distância de Lipschitz
Ω	Região de interação no espaço das posições
Γ	Região de interação no espaço (x, v) .
μ_t	Medida do sistema no espaço Γ
ν	Medida do sistema no espaço (t, v)
T^0	Mapa de evolução de uma medida representando o movimento livre.
$T_{s,t}[\mu]$] Mapa de evolução da medida μ de um instante s a um instante t , dentro da região de interação Γ
$\text{Lip}(\phi)$	Constante de Lipschitz de uma função ϕ
Z_j	Amplitude <i>cartesiana</i> da j -ésima onda ($Z_j = \sqrt{2I_j}e^{-i\theta_j}$)
$R(x)$	Função que define a região de interação unidimensional no espaço das posições
\mathcal{L}	Espaço dos modos coletivos
\mathcal{M}^+	Espaço das medidas positivas em Γ
$d_{\Gamma,[0,T]}$	Distância, no espaço \mathcal{M}^+ .
W_t	Processo de Wiener parametrizado por t
B_t	Movimento Browniano padrão
HMF	Hamiltoniano de Campo Médio
U_c	Energia crítica do modelo HMF
E_s	Energia da separatriz no modelo HMF
PAE	Partículas de alta energia
PBE	Partículas de baixa energia

\mathbb{E} Expectativa (estatística)

β_c Inverso da temperatura crítica no modelo HMF de duas espécies

1 Introdução à física de plasmas - Definições e Descrições do sistema

“A palavra ‘*plasma*’ será usada para designar aquela porção de uma descarga do tipo arco na qual as densidades de íons e elétrons são altas mas substancialmente iguais” ([1], tradução livre). Foi assim que Tonks e Langmuir definiram um plasma pela primeira vez em Física. Essa caracterização, embora suficiente para descrever o sistema que era estudado, não define completamente o que vamos chamar de *plasma*, já que não explicita suas características macroscópicas nem suas características oscilatórias, por exemplo, que são fundamentais no estudo do comportamento dos plasmas.

Partindo da definição de Tonks e Langmuir, pode-se interpretar o plasma como um gás ionizado. Entretanto, não é todo gás ionizado que apresenta o comportamento esperado para um plasma, afinal, todo gás apresenta um certo grau de ionização. É necessário, então, definir critérios de classificação para plasmas. Neste capítulo definimos plasma e suas principais características.

1.1 Características gerais dos plasmas

A matéria no universo visível pode ser classificada em quatro estados (em ordem energética crescente): sólido, líquido, gasoso e plasma. O que distingue os três primeiros estados é o potencial de ligação entre suas partículas constituintes. As forças de agregação decorrentes desse potencial são fortes nos sólidos, fracas nos líquidos e praticamente inexistentes em gases. A caracterização de uma substância em um desses estados depende da energia cinética aleatória (energia térmica) de seus constituintes, em outras palavras, depende de sua *temperatura*. O equilíbrio entre energia térmica e energia potencial de ligação entre partículas determina o estado. Se a energia térmica de um sistema superar a energia de ligação, ocorre uma transição de fase, que se dá a temperatura constante para uma dada pressão. Assim, ao aquecermos suficientemente um sólido, suas partículas adquirem energia térmica necessária para superar a energia de ligação e passar ao estado líquido. A transição do estado líquido ao gasoso é semelhante.

Agora, se aquecermos um gás molecular até que a energia térmica de uma fração considerável de suas moléculas supere à de ligação molecular, teremos um gás de átomos como resultado da “quebra” das moléculas. Se, por sua vez, esse gás de átomos receber energia suficiente para que uma fração suficientemente grande de seus constituintes tenha energia térmica superior à energia de ligação dos elétrons externos, estes se desprendem dos átomos gerando um gás ionizado (é importante comentar que os processos de ionização ocorrem por colisões). Essa passagem não pode, entretanto, ser considerada uma transição de fase abrupta, já que ocorre gradualmente com aumento de temperatura.

Uma maneira de produzir um plasma é, então, aumentar a temperatura de uma substância até que uma ionização alta seja atingida (em equilíbrio termodinâmico, o grau de ionização está fortemente relacionado à temperatura dos elétrons através da equação de Saha - ver [2]). Existem vários exemplos de plasmas na natureza (estrela de nêutrons, corona solar, auroras, nebulosas, cinturão de Van Allen...), mas em laboratórios, os plasmas são mais difíceis de se obter por aquecimento devido à quantidade de energia necessária. Outra maneira de se produzir um plasma é aumentar o grau de ionização acima de seu valor de equilíbrio térmico. Esse processo de ionização pode ser dado por uma descarga elétrica gasosa, como feito por Tonks e Langmuir [1], na qual um campo elétrico acelera os elétrons livres que, por colisão, podem ionizar outros átomos. Como o campo transfere energia de forma mais eficiente aos elétrons, neste processo os elétrons possuem uma temperatura mais elevada do que a dos íons. Um outro processo de ionização é a *fotoionização*, na qual fótons incidentes com energia igual ou superior à de ionização do gás são absorvidos por seus átomos. A energia excedente é transformada em energia cinética dos pares elétron-íon formados. Esse processo pode ser obtido com a utilização de radiação de curto comprimento de onda (por exemplo, a energia potencial de ionização dos elétrons externos do oxigênio atômico é 13.6 eV, que pode ser obtida com radiação na faixa do ultravioleta).

Conforme a ionização se dá no processo de *criação* do plasma, a recombinação de elétrons com íons também acontece formando partículas neutras. Na medida em que as partículas passam de seu estado ionizado (excitado) para o estado neutro (fundamental), radiação é emitida caracterizando o espectro do plasma. Porém, a radiação emitida pelo plasma não provém apenas da recombinação de partículas ionizadas. Devido à presença de campos eletromagnéticos internos ao plasma, partículas carregadas são aceleradas emitindo radiação. De forma semelhante, se uma partícula carregada é desacelerada por colisão Coulombiana, esta emite uma radiação de freamento chamada *bremstrahlung* [2, 3]. Um outro tipo de radiação ocorre na presença de um campo magnético externo. Sob ação desse campo, as partículas carregadas adquirem uma aceleração centrípeta, emitindo radiação eletrociclôtrônica.

Como já foi dito, não é todo gás ionizado que pode ser considerado um plasma. Por exemplo, um gás ionizado fracamente praticamente não emite radiação eletrociclôtrônica. Um gás ionizado com poucos elétrons e muitos íons não apresenta a oscilação de campos eletromagnéticos que caracterizou o *espalhamento* de elétrons no experimento de Tonks e Langmuir. É necessário, aqui, introduzir uma definição apropriada para plasmas:

Um plasma é um gás quase-neutro de partículas neutras e carregadas que exhibe comportamento coletivo [2].

Vamos explorar essa definição e explicar o que é “quase-neutralidade” e “comportamento coletivo”.

1.1.1 Comportamento Coletivo

Como vimos, um plasma é composto por elétrons, íons e partículas neutras, todos com elevada energia cinética devido às altas temperaturas. Conforme as partículas carregadas se movimentam, podem criar no plasma concentrações locais de carga positiva ou negativa, gerando campos elétricos internos ao plasma. As partículas em movimento criam, também, correntes elétricas que geram campos magnéticos. Esses campos afetam o movimento das partículas do plasma. Analisando as forças Coulombianas entre regiões carregadas em um plasma, vemos que são de longo-alcance: vamos supor duas regiões carregadas, *A* e *B*, no plasma separadas por uma distância r . As forças Coulombianas entre as regiões decrescem com $1/r^2$. Entretanto, para um dado ângulo sólido ($\Delta r/r = \text{constante}$, ver figura (1.1)), o volume de plasma em *B* que afeta *A* aumenta com r^3 . Assim, elementos do plasma exercem forças uns sobre os outros mesmo a grandes distâncias.

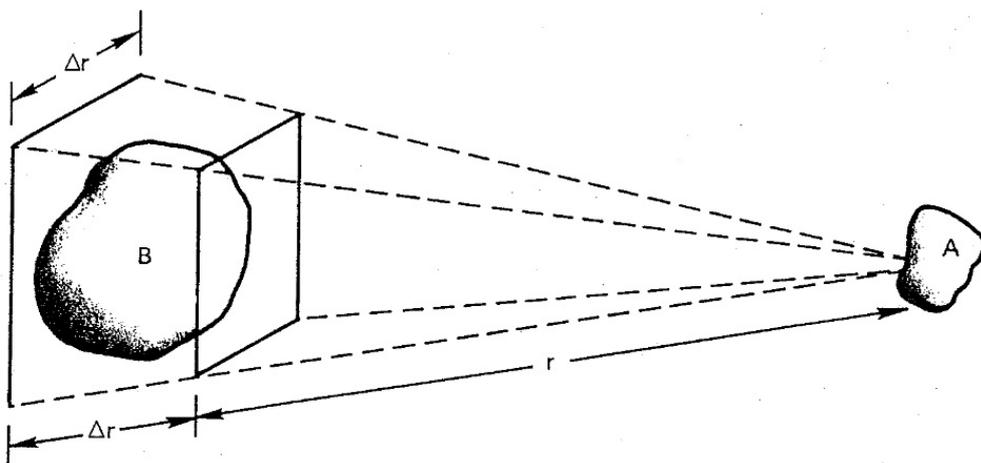


Figura 1.1: Longo alcance das forças Coulombianas em plasmas.

Além dessa força eletromagnética atuando nas partículas do plasma, colisões ocorrem entre elétrons, íons e partículas neutras. Os elétrons, por serem mais leves, possuem velocidades muito maiores do que aquelas dos íons e partículas neutras (caracterizando a “geleia rígida”). Neste aspecto, o plasma apresenta comportamento de fluido.

Temos, então, colisões entre partículas e forças eletromagnéticas de longo alcance no plasma. Uma perturbação externa pode, levando em conta o alcance das forças, se propagar por toda a extensão do plasma. Esse aspecto caracteriza o comportamento coletivo do plasma, enriquecendo o repertório de movimentos, oscilatórios ou não, possíveis nos plasmas.

1.1.2 Quase-neutralidade (*Neutralidade Macroscópica*)

Um plasma é macroscopicamente neutro na ausência de perturbações externas. Da simples definição dada por Tonks e Langmuir podemos inferir essa afirmação, já que a densidade de íons e elétrons é, essencialmente, igual. Em outras palavras, em condições de equilíbrio sem forças externas, em um volume do plasma suficientemente grande para conter um número grande de partículas mas ao mesmo tempo pequeno comparado com as dimensões macroscópicas do sistema, a carga líquida é zero:

$$\sum_i e_i n_i = 0, \quad (1.1.1)$$

onde n_i é a densidade de partículas do tipo i (com carga e_i). Esta característica de neutralidade macroscópica com ionização das partículas define a quase-neutralidade do plasma.

Nesse regime de quase-neutralidade, se o plasma estiver totalmente ionizado (e assim o trataremos nesta tese), a interação entre suas partículas é basicamente apenas eletromagnética; se, mais ainda, o plasma for não-relativístico, podemos assumir que as interações são puramente eletrostáticas. Essas interações em um plasma não são, entretanto, descritas pela lei de Coulomb usual, já que a presença de outras partículas carregadas blinda a interação Coulombiana entre duas partículas em consideração. O movimento das partículas no plasma é afetado por campos eletromagnéticos internos e externos, colisões, qualquer força externa e é, portanto, muito complicado. Devido a isso, a *blindagem* apresenta um caráter dinâmico e bastante complexo. Mas, podemos ter uma boa ideia sobre essa blindagem partindo do caso estático.

Blindagem de Debye

Se inserirmos uma partícula carregada dentro de um plasma, esta será encoberta por uma nuvem de partículas livres, majoritariamente de carga oposta. Consideremos uma nuvem (estática) de elétrons e íons na vizinhança de uma partícula carregada arbitrária em um plasma. O poten-

cial eletrostático (φ) dentro da nuvem satisfaz a equação de Poisson

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{1}{\varepsilon_0} \sum_i e_i n_i, \quad (1.1.2)$$

onde ε_0 é a permissividade elétrica no vácuo.

Se o plasma está em um estado de equilíbrio termodinâmico sujeito ao potencial φ , as partículas apresentam uma distribuição maxwelliana [2, 3]

$$f_i(u) = A \exp \left[- \left(\frac{\frac{1}{2} m_i u^2 + e_i \varphi}{k_B T_{e_i}} \right) \right], \quad (1.1.3)$$

onde u é a velocidade das partículas, T_{e_i} é a temperatura da partícula i , A é uma constante de normalização (dada por $A = n_i \left(\frac{m_i}{2\pi k_B T_{e_i}} \right)^{3/2}$), m_i a massa da partícula de espécie i , e k_B a constante de Boltzmann. Sabendo que a densidade de partículas é dada pela função de distribuição, temos, para um sistema homogêneo

$$\begin{aligned} n_i &= \int_{-\infty}^{\infty} f(u) du \\ &= n_{i0} \exp \left[- \frac{e_i \varphi}{k_B T_{e_i}} \right], \end{aligned} \quad (1.1.4)$$

onde n_{i0} é a densidade de equilíbrio.

Estas densidades devem satisfazer a condição de neutralidade (1.1.1). Pela própria definição de plasma, podemos assumir uma temperatura ($k_B T$) muito alta, permitindo a aproximação

$$\left| \frac{e_i \varphi}{k_B T_{e_i}} \right| \ll 1. \quad (1.1.5)$$

Dada esta aproximação e com as densidades (1.1.4), resolvemos a equação de Poisson, obtendo a seguinte expressão para determinar φ :

$$\begin{aligned} \nabla^2 \varphi &= -\frac{1}{\varepsilon_0} \left[\sum_i e_i n_{i0} - \sum_i \frac{n_{i0} e_i^2 \varphi}{k_B T_{e_i}} \right] \\ \nabla^2 \varphi - \frac{\varphi}{\lambda_D^2} &= 0, \end{aligned} \quad (1.1.6)$$

onde a quantidade λ_D é o denominado *comprimento de Debye* [1, 2, 4],

$$\lambda_D = \left(\frac{\varepsilon_0 k_B T}{\sum_i n_{i0} e_i^2} \right)^{1/2}, \quad (T_{e_i} = T). \quad (1.1.7)$$

Procuramos uma solução esfericamente simétrica para a equação (1.1.6):

$$\varphi \propto \frac{\exp(-r/\lambda_D)}{r}, \quad (1.1.8)$$

o que corresponde a uma energia de interação entre duas partículas carregadas e_1 e e_2 , a uma distância relativa r_{12} , de

$$U_{12} = \frac{e_1 e_2}{r_{12}} \exp\left(-\frac{r_{12}}{\lambda_D}\right). \quad (1.1.9)$$

Logo, o efeito de blindagem no plasma implica na multiplicação de um fator $\exp(-r_{12}/\lambda_D)$ no termo usual de potencial de interação Coulombiana. Como resultado dessa queda na energia potencial, a interação eletrostática de partículas separadas por distâncias maiores que o comprimento de Debye pode ser, muitas vezes, desprezada. Assim, definindo uma *esfera de Debye*, de raio λ_D , dentro do plasma, quaisquer campos eletrostáticos gerados fora da esfera são blindados pelas partículas carregadas e praticamente não contribuem para o campo elétrico em seu centro. Ou seja, o comportamento coletivo que caracteriza o plasma ocorre essencialmente dentro da esfera de Debye. O número de partículas dentro da esfera que interagem coletivamente é dado por

$$N_D = \frac{4\pi}{3} \lambda_D^3 \sum_i n_{i0}. \quad (1.1.10)$$

É preciso ressaltar que a relação (1.1.9) é válida para plasmas em equilíbrio termodinâmico, i. e, assumimos implicitamente que:

$$\left\langle \frac{e^2}{r_{12}} \right\rangle / \left\langle \frac{1}{2} m v^2 \right\rangle \ll 1, \quad (1.1.11)$$

onde $\langle \dots \rangle$ indica média termodinâmica. Percebendo que $\langle \frac{1}{2} m v^2 \rangle \approx T$ e $\langle r_{12} \rangle \approx n^{-1/3}$, o critério (1.1.11) pode ser reescrito como

$$\frac{e^2 n^{1/3}}{T} \ll 1, \quad (1.1.12)$$

o que implica que o plasma deve ser suficientemente quente e suficientemente rarefeito.

Entretanto, a equação (1.1.9) representa um valor médio do potencial de interação das partículas do plasma, ou seja, a blindagem é dinâmica. Portanto, o potencial φ é, necessariamente, uma função oscilatória do tempo, já que partículas carregadas em movimento no plasma, quando no processo de blindagem, oscilam em torno de sua posição de equilíbrio. Assim, a blindagem dinâmica está relacionada à possibilidade de existência de oscilações coletivas no plasma.

Vamos assumir que apenas os elétrons do plasma estão em movimento no processo de blindagem e que o plasma é não relativístico. Se uma camada plana de elétrons é deslocada de

sua posição inicial por uma distância x , de acordo com a equação de Poisson, surge um campo elétrico dado por

$$E = \frac{enx}{\epsilon_0}, \quad (1.1.13)$$

n sendo a densidade dos elétrons e $-e$ sua carga. Esse campo atua nos elétrons que se movimentarão obedecendo a equação de movimento:

$$m_e \frac{d^2x}{dt^2} = -eE = -\frac{e^2nx}{\epsilon_0}, \quad (1.1.14)$$

onde m_e é a massa dos elétrons. Essa equação é a de um oscilador harmônico com frequência

$$\omega_{pe} = \left(\frac{ne^2}{m_e \epsilon_0} \right)^{1/2}. \quad (1.1.15)$$

A existência de oscilações em plasma é, de fato, possível e fortemente relacionada à blindagem das interações. A frequência (1.1.15) determina a oscilação mais simples possível em um plasma, na qual apenas os elétrons participam quando seu movimento térmico pode ser desprezado. Estas oscilações são as chamadas *oscilações de Langmuir* [1, 2, 4], e a frequência (1.1.15) é chamada *frequência natural do plasma* ou *frequência de Langmuir*.

1.1.3 Critérios para o Plasma

Voltemos a um problema importante: como diferenciar um gás ionizado de um plasma? Já sabemos algumas características de um plasma e como, aproximadamente, suas partículas se distribuem e comportam em equilíbrio termodinâmico na ausência de campos externos. Estamos em condições de definir alguns critérios que devem ser satisfeitos para que o gás ionizado seja considerado um plasma.

A relação (1.1.7) define a distância de blindagem do potencial eletrostático em um plasma. Essa blindagem é uma característica do comportamento coletivo das partículas, portanto, precisamos requerer que as dimensões do sistema sejam muito maiores do que λ_D , caso contrário não haveria espaço suficiente para que o gás exiba comportamento coletivo. Este último ocorre dentro do que chamamos esfera de Debye (ver seção anterior), logo, precisamos admitir que o número (1.1.10) de partículas dentro dessa esfera seja muito grande.

Para que o comportamento oscilatório do plasma não seja desprezível, precisamos analisar casos em que as colisões (responsáveis por amortecer as ondas no plasma) possam ser desprezadas. Ou seja, é necessário que a frequência de colisão entre partículas do plasma seja menor do que a frequência natural do plasma ω_{pe} (1.1.15).

Podemos definir L como uma dimensão característica do plasma e τ como o tempo médio entre colisões de partículas do plasma para resumir os critérios em:

1. $L \gg \lambda_D$;
2. $N_D \gg 1$;
3. $\omega_{pe}\tau > 1$.

Esses três critérios, juntamente com a condição de neutralidade (1.1.1), **devem** ser satisfeitos para que um gás ionizado seja considerado um plasma.

É comum definir a função

$$g \equiv \frac{1}{n\lambda_D^3} \quad (1.1.16)$$

como o *parâmetro de plasma*. A aproximação (1.1.12) e o terceiro critério para a existência do plasma podem ser sumarizados por

$$g \ll 1, \quad (1.1.17)$$

o que é conhecido como a *aproximação de plasma*.

1.2 Propagação de ondas em plasmas

Vimos, na Seção 1.1.2, que existem oscilações em plasmas devidas apenas ao seu caráter coletivo e ao seu efeito de blindagem. Em sua forma mais simples, oscilações em plasmas decorrem do movimento dos elétrons em torno de um ponto de equilíbrio com uma frequência dada pela equação (1.1.15). Vamos, agora, sistematizar o estudo de oscilações em plasmas para melhor entender suas propriedades. Usaremos as equações de Maxwell em conjunto com as forças de Lorentz para explicar como as ondas eletromagnéticas se comportam na presença de uma densidade constante de elétrons (com velocidade também constante).

Partimos de um caso simples, com frequência de colisões binárias muito baixa em comparação com a frequência das ondas eletromagnéticas (de fato, vamos desprezar todas as colisões, estudando o caso de *plasmas não-colisionais*), cuja velocidade será considerada muito maior do que a velocidade térmica média das partículas (plasma *frio*). Como faremos até o fim deste trabalho, vamos desconsiderar a influência do movimento dos íons, tratando de um plasma de elétrons. Consideraremos, também, o plasma na ausência de campos externos, assim, toda oscilação decorre do movimento interno de seus componentes.

A densidade $n_e = n_e(\mathbf{r}, t)$ e a velocidade $\mathbf{u}_e = \mathbf{u}_e(\mathbf{r}, t)$ dos elétrons devem satisfazer as equações de continuidade e de movimento

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot n_e \mathbf{u}_e = 0 \quad e \quad (1.2.1)$$

$$\frac{d_e \mathbf{u}_e}{dt} = -\frac{e}{m_e} \{ \mathbf{E} + \mathbf{u}_e \times \mathbf{B} \}, \quad (1.2.2)$$

onde m_e e $-e$ são a massa e a carga do elétron, respectivamente. A derivada total é dada por

$$\frac{d_e}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{u}_e \cdot \nabla) \quad (1.2.3)$$

e \mathbf{E} e \mathbf{B} representam, respectivamente, os campos elétrico e magnético das ondas. Assumindo que o plasma é não relativístico, os campos obedecem às equações de Maxwell

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho / \epsilon_0 \quad (1.2.4)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \left(\mathbf{J} + \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right) \quad (1.2.5)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.2.6)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (1.2.7)$$

onde \mathbf{J} e ρ são as densidades de corrente e de carga produzidas pelos elétrons. A densidade de equilíbrio dos elétrons é, por hipótese, igual à densidade dos íons n_0 . Logo, as densidades nas equações de Maxwell são dadas por

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \mathbf{J}_e = -en_e \mathbf{u}_e \\ \rho &= -e(n_e - n_0), \end{aligned} \quad (1.2.8)$$

lembrando, novamente, que estamos tomando a velocidade dos íons como sendo nula.

Não vamos, neste trabalho, distinguir entre os vetores campo magnético \mathbf{H} e indução magnética \mathbf{B} , uma vez que a permeabilidade magnética de um plasma é, geralmente, muito próxima da unidade ¹

Temos, então, um conjunto completo de equações descrevendo a propagação de ondas eletromagnéticas em um plasma *frio* (equações (1.2.1) à (1.2.8)). Assumindo que a amplitude das ondas seja pequena, podemos usar a forma linearizada da equação de movimento para os elétrons

$$\frac{\partial \mathbf{u}_e}{\partial t} = -\frac{e}{m_e} \mathbf{E}. \quad (1.2.9)$$

¹Para uma melhor discussão sobre a permeabilidade magnética e a magnetização de um plasma, refiro-me aos textos [4] e [5]. Para uma discussão geral sobre a separação da indução magnética em campo magnético e magnetização, refiro-me ao texto [6].

Como estamos interessados em grandezas oscilatórias no plasma, vamos tomar a dependência temporal de todas as variáveis na forma $e^{-i\omega t}$. Logo

$$\mathbf{u}_e = -\frac{ie}{m_e\omega}\mathbf{E}. \quad (1.2.10)$$

Estando no limite de pequenas amplitudes, a densidade dos elétrons difere pouco de seu valor de equilíbrio, permitindo que a densidade de corrente seja dada por

$$\mathbf{J} = -en_0(u_e) \equiv \sigma\mathbf{E}, \quad (1.2.11)$$

onde a condutividade σ na Lei de Ohm assume a forma

$$\sigma(\omega) = \frac{ie^2n_0}{m_e\omega} \quad (1.2.12)$$

e recebe o nome *condutividade de alta-frequência de plasma*.

Agora introduzimos a indução elétrica a partir da equação (1.2.5) na forma

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{B} &= \mu_0 \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \\ \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} &= \mathbf{J} + \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \end{aligned} \quad (1.2.13)$$

para uma onda monocromática obtemos a relação

$$\begin{aligned} \mathbf{D} = \epsilon_0\mathbf{E} + \frac{i}{\omega}\mathbf{J} &= \epsilon_0\mathbf{E} + \frac{i}{\omega}\sigma\mathbf{E} = \epsilon(\omega)\mathbf{E} \\ \epsilon(\omega) &= \epsilon_0 + \frac{i}{\omega}\sigma(\omega). \end{aligned} \quad (1.2.14)$$

Esta última quantidade é a chamada *constante ou permissividade dielétrica do plasma*. Usando a relação (1.2.12) podemos reescrever a constante dielétrica

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 \left(1 - \frac{n_0 e^2}{m_e \epsilon_0 \omega^2} \right), \quad (1.2.15)$$

ou, reconhecendo o termo da frequência natural do plasma

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_{pe}^2}{\omega^2} \right). \quad (1.2.16)$$

A constante dielétrica nos fornece toda a informação necessária para descrever a propagação de ondas eletromagnéticas de um plasma. Para mostrar esse fato, tomemos ondas planas monocromáticas

$$\mathbf{E}, \mathbf{B} \propto e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) - i\omega t} \quad (1.2.17)$$

se propagando em um plasma homogêneo². Neste caso as equações de Maxwell assumem a forma

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mathbf{B}, \quad \nabla \times \mathbf{B} = -i\omega\mu_0\varepsilon(\omega)\mathbf{E}. \quad (1.2.18)$$

Destas últimas equações podemos encontrar a relação direta do campo magnético com o campo elétrico. Usando a dependência dada por (1.2.17), temos

$$\mathbf{B} = \frac{1}{\omega}\mathbf{k} \times \mathbf{E}. \quad (1.2.19)$$

Recuperamos o resultado conhecido de que o campo magnético se propaga perpendicularmente ao campo elétrico e ao vetor de onda. Substituindo a equação (1.2.19) na expressão do rotacional do campo magnético em (1.2.18), chegamos à relação

$$\begin{aligned} \frac{i}{\omega}(\mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times \mathbf{E})) &= i\omega\mu_0\varepsilon(\omega)\mathbf{E} \\ \mathbf{k}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}) - (k^2 - \omega^2\mu_0\varepsilon(\omega))\mathbf{E} &= 0. \end{aligned} \quad (1.2.20)$$

Multiplicando essa última equação escalarmente por \mathbf{k} , temos a condição

$$\varepsilon(\omega)(\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}) = 0. \quad (1.2.21)$$

Dessa condição, vemos que, se $\varepsilon(\omega) \neq 0$, a onda se propaga transversalmente aos campos (onda eletromagnética). Nesse regime, a equação (1.2.20) se escreve

$$\begin{aligned} k^2 - \omega^2\mu_0\varepsilon(\omega) &= 0 \\ k^2 &= \frac{\omega^2}{c^2} \frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_0}. \end{aligned} \quad (1.2.22)$$

Vemos, então, que ondas eletromagnéticas se propagam apenas para $\varepsilon(\omega) > 0$, ou, usando a equação (1.2.16), há propagação quando $\omega > \omega_{pe}$. Substituindo (1.2.16) na relação (1.2.22) temos, finalmente, a relação de dispersão

$$\omega^2 = \omega_{pe}^2 + c^2k^2. \quad (1.2.23)$$

A velocidade de fase da onda, para esse caso,

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{c}{\sqrt{\frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_0}}}, \quad (1.2.24)$$

²Note que, na derivação da equação (1.2.16), não foi feita nenhuma consideração sobre a homogeneidade do plasma. Logo, tal equação é válida tanto para plasmas homogêneos quanto para não-homogêneos

será maior do que a velocidade da luz.

Para o outro possível caso ($\varepsilon(\omega) < 0$), o vetor de onda k assume valores imaginários puros e a onda sofre amortecimento. Uma medida desse amortecimento pode ser obtida a partir da *distância de penetração* da onda no plasma. Esta é dada por

$$l = \frac{1}{|\mathbf{k}|} = \frac{c}{(\omega_{pe}^2 - \omega^2)^{1/2}}. \quad (1.2.25)$$

Claramente, a condição

$$\varepsilon(\omega) = 0 \quad (1.2.26)$$

caracteriza a propagação de ondas longitudinais no plasma (modos coletivos). Novamente, substituindo em (1.2.16), recuperamos a dispersão de ondas de Langmuir

$$\omega^2 = \omega_{pe}^2. \quad (1.2.27)$$

1.2.1 Ondas eletrônicas - correções térmicas

Na obtenção da relação de dispersão (1.2.27) desprezamos qualquer efeito térmico no sistema. Entretanto, com argumentos simples, podemos obter uma nova relação de dispersão que carregue informação do movimento térmico dos elétrons. Primeiramente, escrevemos as variáveis do problema como sendo compostas por duas partes: um valor de equilíbrio, caracterizado por um índice 0; e uma parte perturbativa, resultante das oscilações do sistema e caracterizada pelo índice 1, i.e.

$$n_e = n_0 + n_1, \quad \mathbf{u}_e = \mathbf{u}_0 + \mathbf{u}_1, \quad \mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1. \quad (1.2.28)$$

O movimento térmico dos elétrons gera um gradiente de pressão responsável por propagar a informação das regiões oscilantes do sistema. Para levar em conta este efeito podemos acrescentar um termo $-\nabla p_e$ à equação de movimento (1.2.2), onde p_e é a pressão devida ao movimento dos elétrons. Em uma dimensão,

$$\nabla p_e = 3k_B T_e \frac{\partial n_1}{\partial x} \quad (1.2.29)$$

e a equação de movimento linearizada é dada por

$$m_e n_0 \frac{\partial u_1}{\partial t} = -e n_0 E_1 - 3k_B T_e \frac{\partial n_1}{\partial x}, \quad (1.2.30)$$

onde desprezamos termos da ordem de $n_1 \partial u_1 / \partial t$ e $n_1 E_1$. Procedendo de maneira semelhante à

anterior (assumindo que grandezas oscilantes são $\propto e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})-i\omega t}$), obtemos a relação de dispersão

$$\omega^2 = \omega_{pe}^2 + 3k^2 \frac{k_B T_e}{m_e}, \quad (1.2.31)$$

onde reconhecemos o termo $2k_B T_e/m_e = v_T^2$, como sendo o quadrado da velocidade térmica dos elétrons [2, 4]. Usando esta, escrevemos a relação de dispersão em sua forma final, conhecida como *relação de dispersão de Bohm-Gross*,

$$\omega^2 = \omega_{pe}^2 + \frac{3}{2} k^2 v_T^2. \quad (1.2.32)$$

Note que, neste caso, a dependência da frequência com o número de onda k garante uma velocidade de grupo ($v_g = d\omega/dt$) não-nula, ou seja, o modo é propagativo.

1.3 Descrição cinética

Na última seção, analisamos a propagação de ondas eletromagnéticas em um plasma. Para tal, assumimos que a densidade e a velocidade dos elétrons eram constantes em toda a extensão do plasma, ou seja, descrevemos o plasma a partir de valores médios (macroscópicos) da densidade e da velocidade de seus componentes. Essa descrição é chamada *descrição hidrodinâmica* do plasma.

Mostramos, agora, a descrição *cinética* de um plasma, em que estamos interessados na função de distribuição ($F_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$) das partículas (do tipo α) que compõem o plasma. A função de distribuição é definida de tal maneira que a densidade de partículas do tipo α , com carga e_α , seja dada por [2, 4]

$$n_\alpha(\mathbf{r}, t) = \int F_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3 \mathbf{v}, \quad (1.3.1)$$

e, por extensão, as densidades de carga e de corrente produzidas por partículas do tipo α são dadas, respectivamente, por

$$\rho_\alpha(\mathbf{r}, t) = e_\alpha \int F_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3 \mathbf{v} \quad (1.3.2)$$

$$\mathbf{j}_\alpha(\mathbf{r}, t) = e_\alpha \int \mathbf{v} F_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3 \mathbf{v}. \quad (1.3.3)$$

De maneira mais geral, o valor médio de qualquer função das velocidades ($g(\mathbf{v})$) é dado pela função de distribuição através da relação

$$\langle g(\mathbf{v}) \rangle = \int g(\mathbf{v}) F_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3 \mathbf{v}, \quad (1.3.4)$$

a integração sendo tomada em todo o espaço das velocidades.

Queremos determinar as condições para propagação de ondas eletromagnéticas no plasma. Para tal, novamente usamos as equações de Maxwell para os campos \mathbf{E} e \mathbf{B} . Tomando o rotacional da equação (1.2.7), obtemos

$$\begin{aligned}\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) &= -\frac{\partial(\nabla \times \mathbf{B})}{\partial t} \\ &= -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2},\end{aligned}\quad (1.3.5)$$

onde usamos a equação (1.2.5). Essa última equação nos dá uma relação entre campo elétrico e densidade de corrente elétrica.

Neste estudo, \mathbf{E} é o campo elétrico de uma onda eletromagnética se propagando em um plasma não-colisional e \mathbf{j} é a densidade de corrente elétrica produzida pelo movimento das partículas no plasma,

$$\mathbf{j} = \sum_{\alpha} \mathbf{j}_{\alpha}(\mathbf{r}, t), \quad (1.3.6)$$

onde \mathbf{j}_{α} é dada por (1.3.3).

Podemos obter a função de distribuição a partir de sua derivada temporal total,

$$\begin{aligned}\frac{dF_{\alpha}}{dt} &= \frac{\partial F_{\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \cdot \frac{\partial F_{\alpha}}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \cdot \frac{\partial F_{\alpha}}{\partial \mathbf{v}} \\ \frac{dF_{\alpha}}{dt} &= \frac{\partial F_{\alpha}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) F_{\alpha} + \frac{\mathbf{G}_{\alpha}}{m_{\alpha}} \cdot \frac{\partial F_{\alpha}}{\partial \mathbf{v}},\end{aligned}\quad (1.3.7)$$

onde \mathbf{G}_{α} é a força atuando na partícula do tipo α . Neste trabalho, \mathbf{G}_{α} é a força de Lorentz na partícula carregada, logo

$$\frac{dF_{\alpha}}{dt} = \frac{\partial F_{\alpha}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) F_{\alpha} + \frac{e_{\alpha}}{m_{\alpha}} \left(\{\mathbf{E} + (\mathbf{v} \times \mathbf{B})\} \cdot \frac{\partial F_{\alpha}}{\partial \mathbf{v}} \right), \quad (1.3.8)$$

sendo que os campos elétrico (\mathbf{E}) e magnético (\mathbf{B}) se relacionam pela equação (1.2.7).

Supomos que as variações na função de distribuição se dão, no plasma, apenas por colisões, e, como estamos analisando o caso não-colisional, obtemos a equação

$$\frac{\partial F_{\alpha}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) F_{\alpha} + \frac{e_{\alpha}}{m_{\alpha}} \left(\{\mathbf{E} + (\mathbf{v} \times \mathbf{B})\} \cdot \frac{\partial F_{\alpha}}{\partial \mathbf{v}} \right) = 0, \quad (1.3.9)$$

que é conhecida como *equação de Vlasov* [2, 4, 5, 7, 8]. Esta equação descreve a evolução temporal da função de distribuição F_{α} das partículas do sistema na presença dos campos \mathbf{E} e \mathbf{B} . Estes, por sua vez, são dependentes da distribuição de partículas através das densidades (1.3.2) e (1.3.3). Portanto, a equação de Vlasov é não-linear em F_{α} , tornando sua solução exata difícil

de se obter. No Apêndice A revisamos a derivação formal da equação de Vlasov.

1.4 Descrição dinâmica

Em contraste com a descrição hidrodinâmica, a equação de Vlasov descreve o plasma em uma escala *mesoscópica*, uma vez que faz distinção entre as velocidades (e qualquer outra grandeza dinâmica) de diferentes regiões do sistema. Entretanto, formalmente a descrição cinética é exata no limite $N \rightarrow \infty$ para tempos finitos³ e, além disso, não fornece informação sobre as trajetórias individuais das partículas. Para ter esse tipo de informação, precisamos de uma descrição microscópica do plasma, isto é, queremos conhecer as equações de movimento de cada partícula do sistema.

Em sistemas físicos reais, porém, onde o número de partículas é muito grande ($N \sim 10^{23}$), descrever a trajetória de cada uma destas se torna impraticável. Procuramos, então, algumas simplificações baseadas nas propriedades do plasma, principalmente no comportamento coletivo devido ao longo alcance das forças. Uma simplificação à dinâmica do sistema pode ser feita se trabalharmos em uma dimensão espacial (caso que descreve propagação de ondas ao longo de uma coluna magnética, *lasers* de elétrons livres [46], entre outros.) e se assumirmos condições de contorno periódicas no tamanho L do sistema. O tamanho do sistema deve ser tal que $L \gg \lambda_D$ e, novamente, desprezamos o efeito dos íons massivos no movimento dos elétrons. Estes, por sua vez, têm massa m , carga q e são responsáveis pela dinâmica do sistema. A energia deste sistema é dada por

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + V(x_i, x_j), \quad (1.4.1)$$

onde N é o número de elétrons no sistema e V é a energia potencial coulombiana que pode ser escrita como uma expansão de Fourier na forma

$$V = \frac{1}{2N} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i,j}^N q^2 V_n \cos [k_n(x_i - x_j)], \quad (1.4.2)$$

em que a posição do i -ésimo elétron x_i se relaciona ao seu momento linear $p_i = m\dot{x}_i$. As condições de contorno periódicas associam ao coeficiente de Fourier V_n o número de onda $k_n = 2\pi n/L$.

Como a força em uma partícula será dada pelo gradiente do potencial, a menos de um sinal, a hamiltoniana (1.4.1) fornece uma forma fechada para descrever a dinâmica do sistema na

³Ver capítulo 2.

forma

$$\dot{x}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i}{m} \quad (1.4.3)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial x_i} = \frac{q}{N} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{j=1}^N q k_n V_n \sin [k_n(x_i - x_j)]. \quad (1.4.4)$$

Podemos escrever a equação de movimento (1.4.4) de maneira mais conveniente se introduzirmos a quantidade

$$E_n = \frac{q k_n V_n}{2iN} \sum_{r=1}^N e^{-ik_n x_r}, \quad (1.4.5)$$

com a qual obtemos

$$\ddot{x}_i = \frac{q}{m} \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_n e^{ik_n x_i}. \quad (1.4.6)$$

O movimento de N -corpos é, então, reduzido a uma coleção de movimentos de partículas individuais sujeitas aos campos autoconsistentes E_n . Estes podem ser interpretados como componentes de Fourier do campo elétrico devido a todas as partículas que depende do tempo por meio das expressões (1.4.5) e (1.4.3).

Quando o número de partículas é grande o suficiente, a contribuição de uma única partícula aos campos do plasma (e, por consequência, aos modos coletivos) pode ser desprezada, e podemos tomá-la como partícula teste sob ação dos modos. O efeito de uma onda eletrostática oscilando senoidalmente, com número de onda k , frequência ω e ângulo de fase θ na energia de um elétron é dado na hamiltoniana

$$H_e = \frac{1}{2m} p^2 - A \cos(kx - \omega t - \theta), \quad (1.4.7)$$

onde p é o momento linear do elétron. Procuramos um modelo de interação onda-partícula semelhante que incorpore a simplicidade da expressão (1.4.7). Então, a próxima aproximação que fazemos ao nosso modelo é admitir que as ondas no plasma são geradas pelo movimento das partículas mais lentas, ou seja, que existe um conjunto de partículas rápidas que têm energia cinética suficiente para que sejam consideradas independentes umas das outras enquanto sujeitas às oscilações geradas pelo movimento das partículas lentas.

Desse modo, as partículas lentas, que estão no *bulk* da distribuição, são apenas responsáveis por gerar os modos longitudinais com relação de dispersão dada por (1.2.32). De maneira semelhante a (1.4.7), se considerarmos a existência de N_C partículas na *cauda* da distribuição de velocidades (partículas rápidas) e M ondas geradas pelo *bulk* da distribuição (partículas lentas),

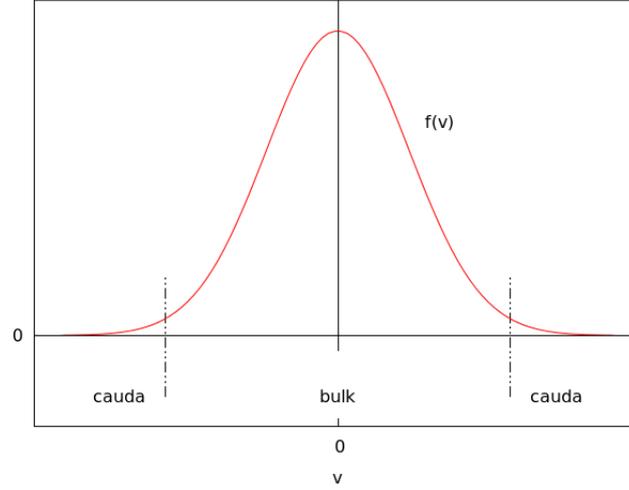


Figura 1.2: Gráfico ilustrando a divisão entre partículas rápidas (cauda) e lentas (bulk).

a hamiltoniana do sistema é dada por

$$H_{ac} = \sum_{i=1}^{N_C} \frac{p_i^2}{2m} - \sum_{i=1}^{N_C} \sum_{r=1}^M A_r \cos(k_r x_i - \omega_{r0} t - \theta_{r0}) + \sum_{r=1}^M H_{r0}, \quad (1.4.8)$$

onde k_r e ω_{r0} se relacionam pela equação (1.2.32) e A_r é a amplitude do potencial da r -ésima onda com fase θ_{r0} . O último termo da hamiltoniana corresponde à energia das ondas livres. Estas são consideradas oscilações harmônicas correspondendo às vibrações dos elétrons do *bulk* da distribuição. Logo,

$$H_{r0} = \omega_{r0} I_r, \quad (1.4.9)$$

onde a ação I_r da r -ésima onda é proporcional a sua energia. Então, o ângulo conjugado a I_r evolui na forma $\theta_r = \theta_{r0} + \omega_{r0} t$ [11]. Sabemos que a energia eletrostática de uma onda é proporcional ao quadrado de sua amplitude [3], portanto

$$H_{ac} = \sum_{i=1}^{N_C} \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{r=1}^M \omega_{r0} I_r - \sum_{i=1}^{N_C} \sum_{r=1}^M c_r \sqrt{I_r} \cos(k_r x_i - \theta_r), \quad (1.4.10)$$

em que c_r são constantes de proporcionalidade.

Tomando a massa dos elétrons $m = 1$, obtemos as equações de evolução

$$\dot{x}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = p_i \quad (1.4.11)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial x_i} = -\sum_{r=1}^M c_r \sqrt{I_r} k_r \sin(k_r x_i - \theta_r) \quad (1.4.12)$$

$$\dot{\theta}_r = \frac{\partial H}{\partial I_r} = \omega_{r0} - \sum_{i=1}^{N_C} \frac{c_r}{2} I_r^{-1/2} \cos(k_r x_i - \theta_r) \quad (1.4.13)$$

$$\dot{I}_r = -\frac{\partial H}{\partial \theta_r} = \sum_{i=1}^{N_C} c_r \sqrt{I_r} \sin(k_r x_i - \theta_r), \quad (1.4.14)$$

onde, agora, a dinâmica possui dois pares de variáveis conjugadas: (x_i, p_i) e (θ_r, I_r) . Pelas equações de movimento, vemos que a dinâmica simplificada gerada por (1.4.10) conserva, além da energia total dada por H_{ac} , o que chamaremos de *momento total*

$$P_{ac} = \sum_{i=1}^{N_C} p_i + \sum_{r=1}^M k_r I_r. \quad (1.4.15)$$

O primeiro termo desta expressão é o momento total das partículas, e o segundo será interpretado como o momento carregado pelas ondas. Note que, com esta interpretação, o momento de uma única onda (k_r, I_r) é proporcional ao quadrado de sua amplitude, assim como o vetor de Poynting de uma onda eletromagnética [3].

Com esta formulação, podemos tratar o plasma como um sistema mecânico com $N_C + M$ graus de liberdade. Isto nos dá a liberdade de usar as ferramentas modernas de sistemas dinâmicos, assim como a de utilizar esquemas numéricos de integração direta das equações diferenciais. Além disso, o conhecimento das trajetórias das partículas do plasma permite uma visão mais intuitiva de sua dinâmica.

Nesta abordagem, assumimos que $N \gg 1$ para poder proceder com as aproximações de campo médio, mas não precisamos do limite formal $N \rightarrow \infty$, no qual os resultados da teoria cinética são válidos. A derivação completa da hamiltoniana (1.4.10) pode ser encontrada em [11] e em suas referências.

1.5 Estrutura da tese

No próximo capítulo, mostramos, formalmente, como a descrição dinâmica se aproxima da descrição cinética no limite de $N \rightarrow \infty$. Para tal, apresentamos uma breve revisão da metodologia usada para a análise e um resumo da estratégia a ser aplicada. Começamos por apresentar um sistema d -dimensional de N partículas em que as interações entre elas acontecem aos pares.

O sistema é descrito, primeiramente, por um conjunto de equações dinâmicas geradas por uma função hamiltoniana. Tomando o limite formal $N \rightarrow \infty$, mostramos que o sistema passa a ser descrito por uma equação cinética para a evolução da função de distribuição do sistema. Em seguida, mostramos que o procedimento é facilmente estendido para incluir um campo magnético externo. Finalmente, passamos à descrição do sistema onda partícula apresentado na Seção 1.4 e mostramos como o limite $N \rightarrow \infty$ implica na descrição cinética da Seção 1.3.

No Capítulo 3 consideremos o modelo onda-partícula no limite de espectro denso, ou seja, quando o número de ondas (modos coletivos auto-consistentes) tende ao infinito. Neste caso, mostramos como a evolução de uma partícula teste pode ser descrita por uma equação diferencial estocástica, uma vez que a influência das várias ondas na partícula pode, formalmente, ser substituída por um ruído na equação de movimento. Além deste resultado, usamos a estratégia do Capítulo 2 para mostrar a existência e a unicidade da solução desta equação. Por último, apresentamos uma simulação numérica do sistema comprovando a unicidade da solução.

Se considerarmos apenas uma onda no sistema onda-partícula, as equações de movimento para as partículas são idênticas àsquelas do modelo Hamiltoniano de Campo Médio (HMF), amplamente estudado na literatura. No capítulo 4 apresentamos uma breve revisão deste modelo junto a seus principais aspectos dinâmicos e sua relação com o modelo onda-partícula. Em seguida, para o caso de um modelo HMF repulsivo de N partículas, utilizamos a linguagem e os resultados do capítulo 3, para mostrar que, usando uma condição inicial apropriada, a evolução das velocidades das partículas pode ser descrita por uma equação diferencial estocástica, uma vez que a magnetização do sistema (parâmetro de ordem associado a um modo coletivo auto-consistente) tende, no limite formal $N \rightarrow \infty$, a um *ruído branco* para tempos longos (dependente de N). Resultados de simulação numérica usando dinâmica molecular são mostrados para comprovar nossos resultados.

Em seguida, analisamos o modelo HMF atrativo, apresentando as principais dificuldades em aplicar a estratégia anterior. Para este caso, apresentamos resultados numéricos mostrando como a evolução das velocidades das partículas diverge, rapidamente, de um ruído semelhante àquele obtido no caso repulsivo.

No capítulo 5, apresentamos uma sugestão de modelo simplificado para descrição de plasmas. Essencialmente, introduzimos o conceito de cargas diferentes no modelo HMF, gerando dois tipos de interação no sistema. Uma vez definida a função hamiltoniana para este caso, descrevemos suas propriedades dinâmicas e, usando os resultados do capítulo 2, usamos uma descrição cinética para obter suas propriedades de equilíbrio. Resultados de simulação de dinâmica molecular do sistema são apresentados para analisar a distribuição no espaço de fases

do sistema.

Finalmente, o Capítulo 6 apresenta as principais conclusões do trabalho juntamente à algumas perspectivas de continuação de estudos.

Apresentamos, também, alguns apêndices com informações úteis à compreensão do trabalho. No Apêndice A mostramos, resumidamente, a obtenção formal da equação de Vlasov por argumentos clássicos de mecânica estatística. A metodologia básica para determinação de existência e unicidade de soluções de sistemas de equações diferenciais é apresentada no Apêndice B, juntamente a uma comparação com a metodologia utilizada ao longo da tese. O Apêndice C resume as principais ferramentas matemáticas utilizadas na análise de equações diferenciais estocásticas.

Finalmente, no Apêndice D mostramos um resultado obtido paralelamente à elaboração desta tese. Consideramos um sistema de N partículas interagindo estocasticamente, ou seja, cuja evolução é descrita por equações diferenciais estocásticas sujeitas a um conjunto de ruídos independentes. Considerando que o único vínculo do sistema seja a conservação da energia total, mostramos que a evolução temporal das velocidades de um número d finito de partículas converge a um processo de Ornstein-Uhlenbeck quando $N \rightarrow \infty$ ($d < N$). A convergência é obtida utilizando a metodologia do Capítulo 3. Resultados de simulação numérica de sistemas estocásticos são apresentados, também, comprovando a convergência obtida analiticamente.

2 *Limite cinético da descrição dinâmica de N-corpos*

2.1 Introdução e breve revisão teórica

No contexto de sistemas de muitas partículas interagindo por forças de longo alcance, é natural tentar substituir a força real em cada partícula, resultante de uma soma de interações aos pares, por sua média espacial. Se a força entre as partículas for fraca, i.e., se a correlação entre estas for desprezível, podemos descrever o sistema por meio de uma densidade $f_t(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ de partículas na posição \mathbf{x} , com velocidade \mathbf{v} no tempo t . Com esta, a força média na posição \mathbf{x} é dada por

$$\mathbf{F}_t(\mathbf{x}) = - \int d^3x' d^3v' f_t(\mathbf{x}', \mathbf{v}') \nabla U(\mathbf{x}, \mathbf{x}'), \quad (2.1.1)$$

assumindo uma força derivada de um potencial de pares $U(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = U(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$.

No caso de partículas sujeitas apenas a forças externas, a evolução de $f_t(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ é dada por

$$\frac{\partial}{\partial t} f_t = -\mathbf{v} \cdot \nabla_x f_t - \frac{1}{m} \mathbf{F}_t \cdot \nabla_v f_t, \quad (2.1.2)$$

onde m é a massa de cada partícula. Desprezando flutuações devidas a colisões ou efeitos de curto alcance, podemos substituir a força nesta última equação pela expressão de campo médio (2.1.1), obtendo

$$\frac{\partial}{\partial t} f_t(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = -\mathbf{v} \cdot \nabla_x f_t(\mathbf{x}, \mathbf{v}) + \frac{1}{m} \left[\int d^3x' d^3v' f_t(\mathbf{x}', \mathbf{v}') \nabla U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right] \cdot \nabla_v f_t(\mathbf{x}, \mathbf{v}), \quad (2.1.3)$$

conhecida como *equação de Vlasov*.¹

Entre as áreas de aplicação da equação de Vlasov, sistemas estelares e física dos plasmas

¹A derivação da equação de Vlasov, usualmente, é dada a partir da redução da equação de Liouville a uma série de equações acopladas relacionando densidades de s partículas (f_s) com densidades de ordens superiores ($s+1$, $s+2$, ...). Esta hierarquia de equações, chamada hierarquia BBGKY, se reduz à eq. de Vlasov assumindo interações fracas e de longo alcance entre as partículas. Alternativamente, a equação de Vlasov é derivada a partir de uma representação diagramática dos termos de interação na hierarquia BBGKY. Para a derivação detalhada da equação de Vlasov, ver [7] e [8].

se destacam, uma vez que a força gravitacional e a de Coulomb são exemplos claros de forças de longo alcance. No caso de plasmas, a equação de Vlasov deve ser acoplada à equação de Poisson [3, 7, 8] descrevendo a evolução do campo eletromagnético gerado pela presença de partículas carregadas [ver Seção 2.3.3].

A aproximação de campo médio é fundamental para a interpretação dos resultados obtidos a partir da equação de Vlasov. Como a densidade no espaço (\mathbf{x}, \mathbf{v}) , dada pela *função de distribuição* f_t permite calcular médias locais de qualquer quantidade dinâmica do sistema, a equação de Vlasov é mais detalhada do que uma equação macroscópica de fluidos (equações de Euler, por exemplo), que permite apenas o cálculo de médias globais. Entretanto, qualquer média local deve ser feita em uma região com um número suficientemente grande de partículas, logo não é possível ter acesso a trajetórias individuais, como no caso das equações hamiltonianas microscópicas. Por esses motivos, nesta tese, nos referimos à equação de Vlasov como uma equação *mesoscópica*.

Estamos interessados, então, nas origens microscópicas da equação de Vlasov, i.e., existe um limite formal no qual os resultados das equações de Hamilton coincidem com os resultados da equação de Vlasov? A função f_t pode ser interpretada como uma distribuição arbitrária de massa no espaço de fase a uma partícula. Logo, podemos substituir f_t em (2.1.3), pela medida $\mu_t(d^3x d^3v)$ no espaço (\mathbf{x}, \mathbf{v}) . Integrando esta equação em uma função teste suave g , temos

$$\frac{\partial}{\partial t} \mu_t(g) = \mu_t(\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{g}) - \mu_t \times \mu_t(\nabla U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \cdot \nabla_{\mathbf{v}} g), \quad (2.1.4)$$

onde $\mu_t(g) = \int \mu_t(d^3x d^3v) g(\mathbf{x}, \mathbf{v})$, $\mu_t \times \mu_t(g) = \int \int \mu_t(d^3x d^3v) \mu_t(d^3x' d^3v') g(\mathbf{x}, \mathbf{v}) g(\mathbf{x}', \mathbf{v}')$ e desprezamos termos de fronteira. Escolhendo como distribuição inicial $\mu_0(d^3x d^3v)$ uma soma de N funções delta

$$\mu_0(d^3x d^3v) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N m \delta(\mathbf{q}_j - \mathbf{x}) \delta(\mathbf{p}_j - m\mathbf{v}) d^3x d^3v, \quad (2.1.5)$$

a solução da equação (2.1.4) é dada pela expressão

$$\mu_t(d^3x d^3v) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N m \delta(\mathbf{q}_j(t) - \mathbf{x}) \delta(\mathbf{p}_j(t) - m\mathbf{v}) d^3x d^3v, \quad (2.1.6)$$

sujeita aos vínculos

$$\frac{d}{dt} \mathbf{q}_j(t) = \mathbf{p}_j(t) \quad (2.1.7)$$

$$\frac{d}{dt} \mathbf{p}_j(t) = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \nabla U(\mathbf{q}_j(t) - \mathbf{q}_i(t)), \quad (2.1.8)$$

para $j = 1, \dots, N$. Essas últimas equações correspondem à dinâmica de N partículas interagindo

através do potencial U . O termo de *força*, dado pelo lado direito da equação (2.1.8), tende à expressão (2.1.1) no limite de $N \rightarrow \infty$. Neste sentido, o limite $N \rightarrow \infty$ é um limite de campo médio.

Entretanto, esta derivação simplificada não é suficiente para estabelecer o limite cinético das soluções de (2.1.7)-(2.1.8), ou seja, não podemos afirmar

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mu_t(d^3x d^3v) = f_t(d^3x d^3v). \quad (2.1.9)$$

Este limite é estabelecido no

Teorema: Seja ∇U limitado e contínuo no sentido de Lipschitz.

1. Então a equação de Vlasov (2.1.4) tem solução única no espaço de medidas finitas \mathcal{M} .
2. Seja $\mu_t(v_t)$ esta solução com dados iniciais $\mu(v)$. Então, na distância de Lipschitz no espaço das funções

$$d_{bL}(v_t, \mu_t) \leq e^{c\|t\|} d_{bL}(v, \mu), \quad (2.1.10)$$

onde c é uma constante dependente apenas de U .

Neste teorema usamos a seguinte

Definição: Considere um volume finito $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$. Seja \mathcal{M} o espaço de medidas em Λ com massa finita. A distância de Lipschitz d_{bL} entre as medidas μ e $\nu \in \mathcal{M}$ é dada por

$$d_{bL} = \sup_{f \in \mathcal{D}} \left| \int_{\Lambda} \mu(d^d x) f(\mathbf{x}) - \int_{\Lambda} \nu(d^d x) f(\mathbf{x}) \right|, \quad (2.1.11)$$

onde $\mathcal{D} = \{f \mid f : \Lambda \rightarrow [0, 1] \text{ e } |f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{y})| \leq |\mathbf{x} - \mathbf{y}|\}$.

A derivação da equação de Vlasov a partir das equações microscópicas (de Hamilton) é consequência direta da desigualdade (2.1.10). Esta limita a distância entre soluções, ou seja, se $\mu_0(d^3x d^3v)$ definida em (2.1.5) é próxima de uma distribuição contínua $\nu_0(d^3x d^3v) = f_0(\mathbf{x}, \mathbf{v}) d^3x d^3v$, no sentido de $d_{bL}(\mu_0, \nu_0) \rightarrow 0$ quando $N \rightarrow \infty$, então $\mu_t(d^3x d^3v)$ é próxima da solução da equação de Vlasov $\nu_t(d^3x d^3v) = f_t(\mathbf{x}, \mathbf{v}) d^3x d^3v$ com dados iniciais ν_0 . A demonstração formal do teorema é dada nos trabalhos de Neunzert [13] e Spohn [14].

Na próxima seção apresentamos os objetivos deste capítulo e as principais motivações do trabalho, enfatizando as limitações dos trabalhos atuais e os pontos de interesse desta tese. Dentro desta seção, a Subseção 2.2.1 mostra a estratégia geral para abordagem dos vários casos

estudados. A Seção 2.3 traz os resultados do trabalho em diferentes subseções. Estas começam com uma descrição do sistema físico a ser estudado, passando pelas definições matemáticas utilizadas para enunciar os respectivos teoremas e são concluídas com as demonstrações necessárias.

2.2 Objetivos

Com o desenvolvimento de teorias para a dinâmica de interação onda-partícula [11], a descrição hamiltoniana de N corpos tem sido aplicada a plasmas (e afins) ao lado do bem estabelecido modelo de Vlasov. Grandes avanços foram alcançados no estudo do limite $N \rightarrow \infty$, no qual a dinâmica se reduz, formalmente, à teoria cinética. Mais precisamente, para forças de longo alcance, e para interações partícula-partícula em aproximações de campo médio na ausência de ondas, mostra-se que o limite $N \rightarrow \infty$ comuta com a dinâmica do sistema [13, 14]. Para o caso de interação onda-partícula, Firpo e Elskens [16] mostram que os métodos de campo médio também podem ser aplicados, provando a equivalência das descrições.

Até então, trabalhos nessa linha assumem condições de contorno periódicas para o sistema. Nosso objetivo é considerar sistemas abertos com extensão finita, em que podemos considerar injeção de partículas e revelar a possível importância dos termos de fronteira, estudando seu limite cinético. Partimos do caso de um sistema aberto de d dimensões no qual partículas interagem por um potencial de pares suave. Neste caso, assumimos que o potencial é duas vezes diferenciável e limitado. Além disso, o potencial deve se anular fora da região de interação que define o sistema aberto finito, fora da qual as partículas são livres. A injeção de partículas é considerada ao darmos informação inicial “falsa” fora da região espacial de interação.

Tendo os resultados deste caso, podemos estudar o comportamento do limite cinético do sistema quando sujeito a um campo magnético externo dependente das coordenadas espaciais.

Como extensão dos resultados, também consideramos o caso de interação onda-partícula em um sistema aberto unidimensional, típico de sistemas de plasmas. Para tal, usamos uma versão modificada da hamiltoniana auto-consistente derivada por Elskens e Escande [11] para descrever o paradigma das interações. Além de considerar o sistema aberto, também incluímos interação partícula-partícula na hamiltoniana. Como no primeiro caso, devemos assumir que todas as interações acontecem *exclusivamente* em uma região fechada do espaço, fora da qual partículas e ondas são livres.

Nas próximas seções, apresentamos os sistemas em consideração e os teoremas básicos para cada um desses, mostrando que o limite cinético e a evolução temporal comutam em qualquer

intervalo de tempo $[0, T]$, com $T < \infty$. Estes teoremas garantem que simulações numéricas de plasmas e sistemas com interação de pares com um número cada vez maior de partículas têm um comportamento cada vez mais próximo daquele previsto pela teoria cinética. Nossa estratégia segue aquela de Neunzert, Spohn e Firpo & Elskens².

2.2.1 Estratégia

Para provar a comutação entre as duas descrições, começamos por escrever a equação de Vlasov (ou do tipo Vlasov) em termos de medidas³. As equações dinâmicas de movimento derivadas de uma hamiltoniana podem, também, ser escritas em termos de medidas evoluindo de acordo com um fluxo dependente do histórico de evolução do sistema.

Após isso, devemos definir uma distância apropriada no espaço das medidas positivas. Procedemos, então, a mostrar que quaisquer duas medidas solução do sistema, inicialmente a uma distância d uma da outra, estão a uma distância de $e^{\xi t}$ em um tempo posterior $t \in [0, T]$, para um T finito e uma constante ξ positiva e finita. Isto é feito por uma série de majorações na distância no tempo t . A comutação segue do fato de que d pode ser escolhida como sendo a distância entre uma medida inicial contínua para o sistema de Vlasov e uma sequência de medidas pontuais inicialmente se aproximando à esta no limite cinético.

Concluimos a prova com uma demonstração da existência das soluções. Para este fim, reformulamos o problema cinético como um problema de ponto fixo no espaço do “histórico de evolução”. O mapa da evolução, então, se mostra uma contração para uma métrica apropriada.

2.3 Resultados

Nesta seção, introduzimos os parâmetros do sistema e as respectivas distâncias no espaço de medidas. Enunciamos, também, os devidos teoremas para cada caso.

2.3.1 Interação partícula-partícula em sistemas de d dimensões

Consideramos partículas interagindo por um potencial $U(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ em um sistema d -dimensional. O potencial é não-nulo apenas em uma região compacta do espaço das posições definida por Ω . Além disso, requeremos que esta região seja convexa, de maneira que partículas não possam re-entrar na região de *interação*. Atenção especial deve ser dada àquelas partículas que podem ser

²Uma breve descrição da estratégia pode ser encontrada em [17].

³Ver Capítulo 5 de [14].

rastreadas no tempo, partindo de um instante t com posição $\mathbf{x} \in \Omega$, até um ponto com posição inicial $\mathbf{x} \in \Omega_c$ (espaço complementar a Ω) e velocidade \mathbf{v} satisfazendo $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_\Omega(\mathbf{x}) < 0$, onde $\mathbf{n}_\Omega(\mathbf{x})$ é o vetor unitário normal a Ω .

Usaremos uma descrição de medidas do sistema (uma vez que a equação de Vlasov é válida para qualquer distribuição de massa no espaço de fase a uma partícula). Usamos a seguinte notação para nos referir ao espaço do sistema:

$$\Omega \times \mathbb{R}^d \equiv \Gamma, \quad (2.3.1)$$

As partículas satisfazem a equação de Vlasov usual

$$\partial_t f_t + \mathbf{v} \cdot \nabla f_t + \mathbf{F} \cdot \nabla_v f_t = 0, \quad (2.3.2)$$

onde f é a função de distribuição de massa das partículas e \mathbf{F} é a força derivada do potencial U .

Para tratarmos o problema de maneira apropriada, devemos identificar duas medidas diferentes: a medida μ_t , no espaço (\mathbf{x}, \mathbf{v}) , representando a distribuição de massa usual; e a medida ν , no espaço (t, \mathbf{v}) , que trata do fluxo de partículas sendo injetadas na região Γ .

A dinâmica do sistema é dada pelas equações

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{x}}(t) &= \mathbf{v}(t) \\ \dot{\mathbf{v}}(t) &= \mathbf{F}(\mathbf{x}(t)) = \int d^d x' d^d v' f_t(\mathbf{x}', \mathbf{v}') \nabla U(\mathbf{x}, \mathbf{x}'), \end{aligned} \quad (2.3.3)$$

onde o potencial varia, suavemente, de zero a seu valor finito quando avançando, no espaço das posições, de um ponto com $\mathbf{x} \in \Omega_c$ para outro com $\mathbf{x} \in \Omega$.

Fora da região Γ , as partículas têm uma distribuição conhecida $g(\mathbf{y}, \mathbf{v})$, tal que podemos associar às medidas μ_t e ν as densidades f e g de maneira que

$$\begin{aligned} d\mu_t(\mathbf{x}, \mathbf{v}) &\longrightarrow f_t(\mathbf{x}, \mathbf{v}) d^d x d^d v \\ d\nu_{in}(t, \mathbf{y}, \mathbf{v}) &\longrightarrow g(\mathbf{y}, \mathbf{v}) |\mathbf{v}_\perp| dt d^d v d^{d-1} y, \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

onde a variável $\mathbf{y} \in \partial\Omega$ e requeremos que ambas f e g sejam idênticas em $\partial\Gamma$ ⁴.

Usamos a notação ν_{in} para indicar que estamos apenas interessados nas partículas que podem ser injetadas em Γ em um tempo finito, i.e., partículas com $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_\Omega(\mathbf{x}) < 0$. Portanto, um estado do sistema é totalmente descrito pelas medidas μ_t e ν e a força \mathbf{F} nas partículas em Γ .

Dada a condição inicial (μ_0, ν) , o sistema evolui, de um tempo 0 a um tempo t , de acordo

⁴Denotamos por ∂A , a fronteira de um espaço A limitado qualquer.

com um fluxo T de dois parâmetros de maneira

$$\mu_t = (\mu_0 + \nu \circ T^0) \circ T_{0,t}[\mu \cdot], \quad (2.3.5)$$

onde o mapa T^0 é apenas o movimento livre, introduzido aqui para considerar a distribuição inicial de partículas fora de Γ .

Seja $C_b^{0,1}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$ o espaço das funções Lipschitz contínuas em $(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$. O espaço das medidas é equipado com a distância

$$d(\mu_t, \mu'_t) = \sup_{\phi \in \mathcal{D}} \left| \int_{\Gamma} \phi(\mathbf{x}, \mathbf{v}) d(\mu_t - \mu'_t) + \int_{\Lambda} \phi(\mathbf{y} - \mathbf{v}t, \mathbf{v}) d(\nu - \nu') \right|, \quad (2.3.6)$$

onde

$$\mathcal{D} = \{ \phi : \phi \in C_b^{0,1}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d), \|\phi\|_{\text{uL}} \leq 1 \} \quad (2.3.7)$$

e

$$\Lambda = \{ (t', \mathbf{y}, \mathbf{v}) \mid t' \in [0, t], \mathbf{y} \in \partial\Omega, \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{\Omega}(\mathbf{x}) < 0 \}. \quad (2.3.8)$$

Usamos a norma de uma função

$$\|\phi\|_{\text{uL}} = \max \{ \|\phi\|_{\text{u}}, \lambda \text{Lip}(\phi) \} \quad (2.3.9)$$

e a norma no espaço (x, v)

$$\|(\mathbf{x}, \mathbf{v}) - (\mathbf{x}', \mathbf{v}')\| = \alpha(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| + \tau|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|), \quad (2.3.10)$$

onde λ é uma constante real de escala e α^{-1} e τ são constantes arbitrárias com dimensões de comprimento e tempo, respectivamente.

Para evitar a contagem das partículas com $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{\Omega}(\mathbf{x}) = 0$ (que não contribuem ao campo de força em Γ), requeremos, ainda, que as funções ϕ sejam tais que

$$\phi(\mathbf{w}') = 0, \quad (2.3.11)$$

dado $\mathbf{w}' \in \partial\Gamma$.

Note que nossa distância é definida de maneira a garantir

$$\left| \int_{\Gamma} h_t(\mathbf{x}, \mathbf{v}) d(\mu_t - \mu'_t) \right| \leq \|h_t(\mathbf{x}, \mathbf{v})\|_{\text{uL}} d(\mu_t, \mu'_t), \quad (2.3.12)$$

para qualquer função h bem comportada.

Dados estes parâmetros, podemos enunciar o teorema seguinte.

Teorema Seja $|\nabla U| \leq B$ e $|\nabla U(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \nabla U(\mathbf{x}', \mathbf{y})| \leq L|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$, onde $L \in \mathbb{R}_*^+$.

1. A equação de Vlasov (2.3.2) tem solução única no espaço de medidas finitas \mathcal{M} ;
2. Dados dois conjuntos de condições iniciais, (μ_0, ν) e (μ'_0, ν') , a dinâmica do sistema gera as soluções (μ_t, ν) e (μ'_t, ν') para qualquer $t > 0$, respectivamente, tal que

$$d(\mu_t, \mu'_t) \leq e^{Ct} d(\mu_0, \mu'_0), \quad (2.3.13)$$

onde C é uma constante positiva dependente de U .

Ao notar que diferentes medidas iniciais no teorema podem se referir tanto a medidas contínuas para a equação de Vlasov quanto a sequências discretas definindo a distribuição inicial no espaço (\mathbf{x}, \mathbf{v}) , podemos mostrar a convergência de ambos os casos no limite cinético ($N \rightarrow \infty$).

Demonstração do Teorema

Nesta seção apresentamos a demonstração formal do teorema enunciado na seção anterior. Começamos pela demonstração da existência de soluções.

◇ **Demonstração do item 2:** Por triangularidade

$$\begin{aligned} d(\mu_t, \mu'_t) &= d((\mu_0 + \nu \circ T^0) \circ T_{0,t}[\mu], (\mu'_0 + \nu' \circ T^0) \circ T_{0,t}[\mu']) \\ &\leq d((\mu_0 + \nu \circ T^0) \circ T_{0,t}[\mu], (\mu_0 + \nu \circ T^0) \circ T_{0,t}[\mu']) \end{aligned} \quad (2.3.14)$$

$$+ d((\mu_0 + \nu \circ T^0) \circ T_{0,t}[\mu'], (\mu'_0 + \nu' \circ T^0) \circ T_{0,t}[\mu']) \quad (2.3.15)$$

O segundo termo é limitado por

$$d((\mu_0 + \nu \circ T^0) \circ T_{0,t}[\mu'], (\mu'_0 + \nu' \circ T^0) \circ T_{0,t}[\mu']) \leq e^{Lt} d(\mu_0, \mu'_0), \quad (2.3.16)$$

uma vez que $h_t = e^{-Lt} \phi \circ T_{t,0}[\mu']$ satisfaz (2.3.12).

Seja $\mathbf{w} \equiv (\mathbf{x}, \mathbf{v})$ e $\mathbf{G}[\mu]$ o campo vetorial no espaço (\mathbf{x}, \mathbf{v}) definido pelo lado direito da equação 2.3.3.

$$\mathbf{G}[\mu] = \dot{\mathbf{w}}. \quad (2.3.17)$$

Note, também que

$$\begin{aligned}
& d((\mu_0 + \nu \circ T^0) \circ T_{0,t}[\mu], (\mu_0 + \nu \circ T^0) \circ T_{0,t}[\mu']) \\
& \leq \sup_{\phi \in \mathcal{D}} \left| \int_{\Gamma} d\mu_0(\phi \circ T_{t,0}[\mu] - \phi \circ T_{t,0}[\mu']) \right| \\
& \quad + \sup_{\phi \in \mathcal{D}} \left| \int_{\Lambda} (d\nu \circ T^0)(\phi \circ T_{t,0}[\mu] - \phi \circ T_{t,0}[\mu']) \right| \quad (2.3.18)
\end{aligned}$$

O segundo termo do lado direito da desigualdade é limitado por

$$\eta_t := \int_{\Lambda} (d\nu \circ T^0) \lambda^{-1} |T_{t,0}[\mu] - T_{t,0}[\mu']| \quad (2.3.19)$$

dado que $\lambda \text{Lip}(\phi) \leq 1$. Reescrevendo este último termo, temos

$$\begin{aligned}
\eta_t &= \int_{\Lambda} (d\nu \circ T^0) \lambda^{-1} \left| \int_0^t (\mathbf{G}[\mu]_s T_{s,0}[\mu] \mathbf{w} - \mathbf{G}[\mu']_s T_{s,0}[\mu'] \mathbf{w}) ds \right| \\
&\leq \eta_I + \eta_{II}, \quad (2.3.20)
\end{aligned}$$

onde,

$$\eta_I = \int_{\Lambda} (d\nu \circ T^0) \lambda^{-1} \left| \int_0^t (\mathbf{G}[\mu]_s T_{s,0}[\mu] \mathbf{w} - \mathbf{G}[\mu']_s T_{s,0}[\mu] \mathbf{w}) ds \right| \quad (2.3.21)$$

$$\eta_{II} = \int_{\Lambda} (d\nu \circ T^0) \lambda^{-1} \left| \int_0^t (\mathbf{G}[\mu']_s T_{s,0}[\mu] \mathbf{w} - \mathbf{G}[\mu']_s T_{s,0}[\mu'] \mathbf{w}) ds \right|. \quad (2.3.22)$$

Procuramos, primeiro, por um limite para (2.3.21)

$$\begin{aligned}
\eta_I &\leq \lambda^{-1} \int_{\Lambda} (d\nu \circ T^0) \int_0^t |\mathbf{G}[\mu]_s T_{s,0}[\mu] \mathbf{w} - \mathbf{G}[\mu']_s T_{s,0}[\mu] \mathbf{w}| ds \\
&= \lambda^{-1} \int_{\Lambda} \int_0^t |\mathbf{G}[\mu]_s(\mathbf{w}) - \mathbf{G}[\mu']_s(\mathbf{w})| \underbrace{(T_{s,0}[\mu] d\nu \circ T^0)}_{\equiv d\nu_s} ds \\
&= \lambda^{-1} \int_{\Lambda} \int_0^t \underbrace{|\mathbf{G}[\mu]_s(\mathbf{w}) - \mathbf{G}[\mu']_s(\mathbf{w})|}_{\equiv \gamma} d\nu_s ds
\end{aligned} \quad (2.3.23)$$

Usando a definição (2.3.10),

$$\begin{aligned}
\gamma &= 0 + \alpha \tau \left| \int_{\Gamma} \partial_x U(x, x') d(\mu_s - \mu'_s)(x') \right| \\
&\leq \alpha \tau C \int_{\Gamma} \left| \frac{\partial_x U(x, x')}{C} \right| d(\mu_s - \mu'_s)(x') \\
&\leq L_I d_{\Gamma}(\mu_s, \mu'_s) \quad (2.3.24)
\end{aligned}$$

com $L_I = \alpha\tau C$, e $\left| \frac{\partial_x U(x, x')}{C} \right| \in \mathcal{D}$, escolhendo

$$C \equiv \max \{B, \lambda L\}. \quad (2.3.25)$$

Aqui, a distância $d_\Gamma(\cdot, \cdot)$ se refere à parte de $d(\cdot, \cdot)$ que envolve apenas integração no espaço Γ . Logo,

$$\eta_I \leq L_I \int_\Lambda \int_0^t d_\Gamma(\mu_s, \mu'_s) ds dv_s. \quad (2.3.26)$$

A majoração de η_{II} pode ser feita usando o fato de que requeremos que a força seja Lipschitz contínua com constante $\text{Lip} = L$. Logo,

$$\eta_{II} \leq \int_\Lambda (dv \circ T^0) \lambda^{-1} \int_0^t \underbrace{|\mathbf{G}[\mu']_s T_{s,0}[\mu] \mathbf{w} - \mathbf{G}[\mu']_s T_{s,0}[\mu'] \mathbf{w}|}_{\equiv \beta} ds. \quad (2.3.27)$$

$$\begin{aligned} \beta &\leq \frac{\alpha}{\alpha\tau} |T_{s,0}[\mu] \mathbf{w} - T_{s,0}[\mu'] \mathbf{w}| + \frac{\alpha\tau L}{\alpha} |T_{s,0}[\mu] \mathbf{w} - T_{s,0}[\mu'] \mathbf{w}| \\ &= L_{II} |T_{s,0}[\mu] \mathbf{w} - T_{s,0}[\mu'] \mathbf{w}|, \end{aligned} \quad (2.3.28)$$

onde $L_{II} = \frac{\tau^2 L + 1}{\tau}$. Portanto,

$$\eta_{II} \leq L_{II} \int_0^t \eta_s ds. \quad (2.3.29)$$

Finalmente, temos

$$\eta_t \leq L_I \int_\Lambda \int_0^t d_\Gamma(\mu_s, \mu'_s) dv_s ds + L_{II} \int_0^t \eta_s ds. \quad (2.3.30)$$

Usando o lema de Gronwall, obtemos

$$\eta_t \leq L_I \left(\int_\Lambda dv_s \right) \int_0^t d_\Gamma(\mu_s, \mu'_s) e^{L_{II}(t-s)} ds. \quad (2.3.31)$$

Precisamos, agora, encontrar um limite superior para o primeiro termo do lado direito da desigualdade (2.3.18). Este termo é limitado por

$$\eta'_t := \int_\Gamma d\mu_0 \lambda^{-1} |T_{t,0}[\mu] - T_{t,0}[\mu']|. \quad (2.3.32)$$

Note que a derivação de (2.3.31) independe da medida $(dv \circ T^0)$, que apenas contribui com o termo $(\int_\Lambda dv_s)$ na majoração final. Logo, o limite superior para η'_t pode ser escrito como

$$\eta'_t \leq L_I \left(\int_\Gamma d\mu_s^\Omega \right) \int_0^t d_\Gamma(\mu_s, \mu'_s) e^{L_{II}(t-s)} ds, \quad (2.3.33)$$

onde

$$\mu_s^\Omega = \mu_0 \circ T_{0,s}[\mu]. \quad (2.3.34)$$

Assumimos, ainda, que há um limite superior para a massa total do sistema, i.e. , que a massa inicial do sistema é finita e que, em um tempo finito, a massa injetada no sistema é finita. Em termos das medidas do sistema, exigimos que

$$\int_\Gamma d\mu_s^\Omega + \int_\Lambda dv_s \leq M < \infty. \quad (2.3.35)$$

Logo, usando esta hipótese e os resultados (2.3.16), (2.3.31) e (2.3.33), obtemos

$$d(\mu_t, \mu'_t) \leq e^{Lt} d(\mu_0, \mu'_0) + ML_t \int_0^t d_\Gamma(\mu_s, \mu'_s) e^{L(t-s)} ds. \quad (2.3.36)$$

Note que, para $t = 0$, o sinal de igualdade vale na expressão. Aplicando o lema de Gronwall mais uma vez, provamos a expressão (2.3.13). \square

◇ **Demonstração do item 1:** A evolução (2.3.5) define um mapa \mathcal{T} , tal que

$$\mu. \longmapsto (\mu_0 + v. \circ T^0) \circ T_{0,.}[\mu]. \quad (2.3.37)$$

O mapa \mathcal{T} é definido no espaço $C_{\mathcal{M}}$ de medidas (fracamente) contínuas dependentes do tempo do tipo $[0, T] \longmapsto \mathcal{M}$, com condições iniciais como em (2.3.37). O espaço (\mathcal{M}, d) é um espaço métrico completo, portanto $(C_{\mathcal{M}}, d_\kappa)$ também é. Logo, a fim de facilitar a notação

$$[\mathcal{T}(\mu.)](t) = \mu_t. \quad (2.3.38)$$

No espaço $C_{\mathcal{M}}$, definimos a distância

$$d_\kappa(\mu., \mu') = \sup_{t \in [0, T]} d(\mu_t, \mu'_t) e^{-\kappa t}, \quad (2.3.39)$$

onde κ é uma constante real positiva arbitrária.

Note que

$$\begin{aligned}
d([\mathcal{T}(\mu.)](t), [\mathcal{T}(\mu')](t)) &= d((\mu_0 + \mathbf{v} \circ T^0) \circ T_{0,t}[\mu.], (\mu_0 + \mathbf{v} \circ T^0) \circ T_{0,t}[\mu']) \\
&\leq \eta_t + \eta'_t \\
&\leq ML_I \int_0^t d(\mu_s, \mu'_s) e^{L_{II}(t-s)} ds \\
&= ML_I \int_0^t d(\mu_s, \mu'_s) e^{L_{II}(t-s)} e^{-\kappa t} e^{\kappa t} ds \\
&\leq ML_I \sup_{s \in [0, T]} (d(\mu_s, \mu'_s) e^{-\kappa t}) \int_0^t e^{L_{II}(t-s)} e^{-\kappa t} ds \\
&\leq ML_I d_\kappa(\mu., \mu') \frac{e^{\kappa t}}{\kappa - L_{II}}.
\end{aligned} \tag{2.3.40}$$

escolhendo $\kappa > L_{II}$. Portanto, multiplicando os dois lados da última desigualdade por $e^{-\kappa t}$ e aplicando o operador $\sup_{t \in [0, T]}$,

$$d_\kappa(\mathcal{T}(\mu.), \mathcal{T}(\mu')) \leq \frac{ML_I}{\kappa - L_{II}} d_\kappa(\mu., \mu'). \tag{2.3.41}$$

Vemos, então, que a escolha apropriada da constante κ garante que o mapa \mathcal{T} é uma contração. Portanto, o teorema do ponto fixo de Banach, garante que a evolução (2.3.5) tem solução única. \square

2.3.2 Campo magnético externo

Agora, consideramos um sistema tridimensional de partículas interagindo, como anteriormente, através de seu potencial de campo médio. Consideramos, ainda, um campo magnético externo, com intensidade dependente das coordenadas espaciais e direção dada por \hat{e}_B , agindo sobre o sistema. Logo, as equações de movimento para uma partícula são dadas por

$$\dot{\mathbf{x}}_r(t) = \mathbf{v}_r(t) \tag{2.3.42}$$

$$\dot{\mathbf{v}}_r(t) = \mathbf{F}_U(\mathbf{x}_r(t)) + \mathbf{F}_B(\mathbf{x}_r(t)), \tag{2.3.43}$$

onde

$$\mathbf{F}_U(\mathbf{x}_r(t)) = - \sum_{r'} \nabla U(\mathbf{x}_r(t), \mathbf{x}'_r(t)) \tag{2.3.44}$$

e

$$\mathbf{F}_B(\mathbf{x}_r(t)) = \mathbf{v}_r(t) \times \mathbf{B}(\mathbf{x}_r(t)), \tag{2.3.45}$$

com uma escolha adequada das dimensões de massa e carga.

O modelo cinético dual às equações (2.3.42) e (2.3.43) é o de Vlasov, dada uma função de

distribuição a uma partícula f satisfazendo

$$\partial_t f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) + \mathbf{v} \cdot \nabla f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) + \dot{\mathbf{v}} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = 0, \quad (2.3.46)$$

dado que

$$\dot{\mathbf{v}}(t) = - \int d^3 x' d^3 v' f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \nabla U(\mathbf{x}(t), \mathbf{x}'(t)) + \mathbf{v}(t) \times \mathbf{B}(\mathbf{x}(t)). \quad (2.3.47)$$

O movimento das partículas sob influência exclusiva da força de potencial de campo médio (\mathbf{F}_U) gera uma solução única ao sistema, como visto na seção anterior. Trabalharemos, separadamente, o termo de força magnética. Novamente, o espaço de medidas positivas é equipado com a distância (2.3.6) e as definições que a seguem. O campo magnético é não-nulo apenas em uma região fechada, compacta e convexa do espaço definida por Ω . Em Ω_c , as partículas são livres. Requeremos, ainda, que o campo magnético satisfaça, para todo $(\mathbf{x}(t), t)$

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}(t)) \leq \beta \quad (2.3.48)$$

$$\text{Lip}(\mathbf{B}(\mathbf{x}(t))) \leq Q, \quad (2.3.49)$$

onde β e Q são constantes reais positivas.

Para este caso, as posições e velocidades das partículas determinam uma sequência de medidas pontuais no espaço $\Gamma = \Omega \times \mathbb{R}^3$,

$$\sigma^L(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \varepsilon \sum_r \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_r(t)) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_r(t)). \quad (2.3.50)$$

No limite cinético, consideramos uma sequência de medidas (2.3.50) convergindo a uma medida contínua σ definida por uma densidade positiva dada por $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d^3 x d^3 v$.

Teorema Seja $|\mathbf{B}(\mathbf{x}(t))| \leq \beta$ e $\text{Lip}(\mathbf{B}(\mathbf{x}(t))) \leq Q$, onde $Q \in \mathbb{R}_*^+$.

1. A equação de Vlasov (2.3.46) tem solução única no espaço de medidas finitas \mathcal{M} ;
2. Dados dois conjuntos de condições iniciais, (μ_0, ν) e (μ'_0, ν') , a dinâmica do sistema sob influência do campo magnético \mathbf{B} gera as soluções (μ_t, ν) e (μ'_t, ν') para qualquer $t > 0$, respectivamente, tal que

$$d(\mu_t, \mu'_t) \leq e^{Ct} d(\mu_0, \mu'_0), \quad (2.3.51)$$

onde C é uma constante positiva dependente de U , β e Q .

Para demonstrar o teorema precisamos da seguinte,

Proposição: para quaisquer duas funções g e $h \in C_b^{0,1}(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)$, o seguinte é válido

$$\|g \cdot h\|_{uL} \leq 2\|g\|_{uL}\|h\|_{uL}. \quad (2.3.52)$$

◇ **Demonstração:** : Primeiramente, note que

$$\begin{cases} \|gh\|_u \leq \|g\|_u \cdot \|h\|_u \\ \text{Lip}(gh) \leq \|g\|_u \text{Lip}(h) + \|h\|_u \text{Lip}(g). \end{cases} \quad (2.3.53)$$

Claramente,

$$\text{Lip}(gh) \leq \|g\|_{uL}\|h\|_{uL} + \|h\|_{uL}\|g\|_{uL}. \quad (2.3.54)$$

Também, note

$$\|gh\|_u \leq \|g\|_{uL}\|h\|_{uL}. \quad (2.3.55)$$

Portanto, temos

$$\|g \cdot h\|_{uL} \leq 2\|g\|_{uL}\|h\|_{uL}. \quad (2.3.56)$$

□

◇ **Demonstração: do Teorema:** Seja $\mathbf{G}[\mathbf{B}(\mathbf{x}(t))]$ o campo vetorial associado à evolução do sistema sobre influência exclusiva do campo magnético \mathbf{B} (i.e., considerando apenas a força \mathbf{F}_B no sistema). Logo, para o vetor $\mathbf{w} = (\mathbf{x}, \mathbf{v})$, temos a equação

$$\dot{\mathbf{w}}(t) = \mathbf{G}[\mathbf{B}(\mathbf{x}(t))]\mathbf{w}(t), \quad (2.3.57)$$

descrevendo a dinâmica do sistema na presença exclusiva do campo \mathbf{B} . Podemos, ainda, escrever a evolução de \mathbf{w} em função das medidas μ_t e ν_t , definidas na seção anterior, como

$$\mu_t = (\mu_0 + \nu_t \circ T^0) \circ T_{0,t}[\mathbf{B}(\cdot, \cdot)], \quad (2.3.58)$$

onde o fluxo T depende apenas do campo nas posições $\mathbf{x}(s)$, $s \in [0, t]$.

A demonstração, então, se torna idêntica à do teorema anterior, notando que, a passagem

equivalente a (2.3.24) é

$$\begin{aligned}
\gamma &= 0 + \alpha\tau|\dot{\mathbf{v}}(\mathbf{B}(\mathbf{x})) - \dot{\mathbf{v}}(\mathbf{B}(\mathbf{x}'))| \\
&= \alpha\tau|\mathbf{v}(s) \times \mathbf{B}(\mathbf{x}(s)) - \mathbf{v}(s) \times \mathbf{B}(\mathbf{x}'(s))| \\
&= \alpha\tau\beta|\mathbf{v}(s) \times \hat{e}_B - \mathbf{v}(s) \times \hat{e}_B| = 0.
\end{aligned} \tag{2.3.59}$$

Portanto, η_t é nulo para este caso, e a expressão final para a distância entre soluções é dada por

$$d(\mu_t, \mu'_t) \leq e^{L_B t} d(\mu_0, \mu'_0), \tag{2.3.60}$$

de forma equivalente à expressão (2.3.16), usando a Proposição 1 para escrever

$$L_B = 2\|\mathbf{v}\|_{uL}\|\mathbf{B}\|_{uL}. \tag{2.3.61}$$

□

2.3.3 Interação onda-partícula e partícula-partícula em sistemas unidimensionais

Considere um sistema unidimensional de partículas carregadas interagindo por um potencial de pares em uma região fechada definida por posições $\in \Omega \equiv [0, L]$, $L \in \mathbb{R}_*^+$. Nesta região, as partículas também interagem com ondas de frequências naturais ω_{0j} , números de onda k_j , fases θ_j e intensidades I_j .

A hamiltoniana que descreve este sistema é dada por ⁵

$$\begin{aligned}
H(x, p, X, Y) &= \sum_r \frac{p_r^2}{2} + \sum_j H_{0j}(X_j, Y_j) + \varepsilon \sum_{r,j} k_j^{-1} \beta_j (Y_j \sin k_j x_r - X_j \cos k_j x_r) R(x_r) \\
&\quad + \varepsilon' \sum_{r,r'} U(x_r, x'_r) R(x_r) R(x'_r),
\end{aligned} \tag{2.3.62}$$

onde (x_r, p_r) são variáveis canônicas de posição e momento da r -ésima partícula no sistema e (X_j, Y_j) são variáveis canônicas para as componentes *cartesianas* do modo complexo

$$Z_j = X_j + iY_j, \tag{2.3.63}$$

relacionado às componentes de intensidade e fase da onda por

$$Z_j = \sqrt{2I_j} e^{-i\theta_j}. \tag{2.3.64}$$

⁵Esta hamiltoniana é uma modificação daquela em [11] somada a um termo de interação partícula-partícula conforme [14], confinada a uma região de $R(x)$ positivo.

ε e ε' são constantes de acoplamento escolhidas de forma a evitar divergências no limite $N \rightarrow \infty$ (neste limite, esperamos que $\varepsilon'N = 1$, por exemplo). Os primeiros dois termos da equação (2.3.62) correspondem, respectivamente, às partículas e às ondas livres, e o terceiro termo corresponde ao acoplamento onda-partícula em Ω . O último termo se refere à interação partícula-partícula, dado que U é o potencial de pares limitado e Lipschitz contínuo, tomado como sendo simétrico em relação a seus argumentos. Como estamos considerando que todas as interações acontecem apenas em Ω , introduzimos a função R na hamiltoniana, definida como sendo uma função Lipschitz contínua com valor zero para todo $x \in]-\infty, -\delta[$ e $x \in]L + \delta, \infty[$, e valor 1 para $x \in [\delta, L - \delta]$, dada uma constante positiva pequena δ . Portanto, fora de Ω , a hamiltoniana apenas expressa o movimento livre das partículas e das ondas.

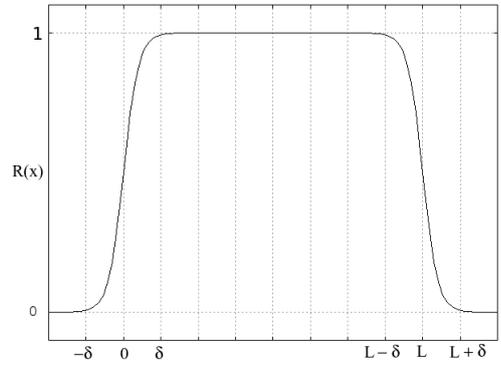


Figura 2.1: Função R definindo a região de interação.

As equações dinâmicas para o sistema são

$$\dot{x}_r = p_r \quad (2.3.65)$$

$$\begin{aligned} \dot{p}_r = & R(x_r) \sum_j \varepsilon \beta_j \frac{(Z_j e^{ik_j x_r} - Z_j^* e^{-ik_j x_r})}{2i} - \sum_{r'} \varepsilon' \partial_{x_r} U(x_r, x_r') R(x_r) R(x_r') \\ & + \sum_j \varepsilon \beta_j k_j^{-1} \frac{(Z_j e^{ik_j x_r} + Z_j^* e^{-ik_j x_r})}{2} \partial_{x_r} R(x_r) - \sum_{r'} \varepsilon' U(x_r, x_r') \partial_{x_r} R(x_r) R(x_r') \end{aligned} \quad (2.3.66)$$

$$\dot{Z}_j = -i\omega_j Z_j + \sum_r \varepsilon \beta_j k_j^{-1} i e^{-ik_j x_r} R(x_r), \quad (2.3.67)$$

onde escolhemos H_{0j} como o termo do oscilador harmônico

$$H_{0j} = \sum_j \omega_j \frac{X_j^2 + Y_j^2}{2}. \quad (2.3.68)$$

Introduzimos, agora, a variável v_r que pode substituir p_r , uma vez que estamos tomando todas as partículas da mesma espécie e com massa unitária. Além disso, introduzimos os enve-

lopes de onda

$$a_j(t) = C^{-1} Z_j(t) e^{i\omega_0 j t}, \quad (2.3.69)$$

com uma constante de escala C . Por simplicidade, neste trabalho usamos a constante redefinida $\beta'_j = \varepsilon \beta_j C$ e trabalhamos apenas com um modo, não usando mais o subíndice j . Portanto, reescrevemos

$$\dot{x}_r = v_r \quad (2.3.70)$$

$$\begin{aligned} \dot{v}_r = & R(x_r) \frac{\beta'_j}{2i} (a e^{ikx_r - i\omega_0 t} - a^* e^{-ikx_r + i\omega_0 t}) - \sum_{r'} \varepsilon' \partial_{x_r} U(x_r, x'_r) R(x_r) R(x'_r) \\ & + \varepsilon \frac{\beta'_j}{2k} (a e^{ikx_r - i\omega_0 t} + a^* e^{-ikx_r + i\omega_0 t}) \partial_{x_r} R(x_r) - \sum_{r'} \varepsilon' U(x_r, x'_r) \partial_{x_r} R(x_r) R(x'_r) \end{aligned} \quad (2.3.71)$$

$$\dot{a} = \frac{i\beta'_j}{C^2 k} \sum_r e^{-ikx_r + i\omega_0 t} R(x_r). \quad (2.3.72)$$

As posições e velocidades das partículas determinam uma soma empírica σ^R de medidas pontuais no espaço $\Gamma \equiv \Omega \times \mathbb{R}$,

$$\sigma^R(x, v, t) = \eta \sum_r \delta(x - x_r(t)) \delta(v - v_r(t)) R(x_r), \quad (2.3.73)$$

contando partículas em Γ ⁶. O fator η é escolhido de maneira a manter uma massa finita no limite cinético.

O espaço Γ é equipado com a distância

$$\|(x, v) - (x', v')\| = \alpha(|x - x'| + \tau|v - v'|), \quad (2.3.74)$$

dados que α^{-1} e τ têm, respectivamente, dimensões de comprimento e de tempo. No espaço dos modos, \mathcal{L} , usamos a distância

$$\|a - a'\| = \zeta|a - a'|, \quad (2.3.75)$$

com um coeficiente real positivo ζ .

O limite cinético em que estamos interessados corresponde à sequência de medidas pontuais σ^R convergindo à medida contínua σ , definida por uma densidade positiva $f(x, v, t)$ em Γ , onde a densidade f é uma solução (fraca) do sistema do tipo Vlasov, dual a (2.3.70)-(2.3.72), dado por

$$\partial_t f + v \partial_x f + F[f, a] \partial_v f = 0 \quad (2.3.76)$$

⁶Note que, como estamos tratando de um espaço aberto e considerando injeção de partículas, esta medida não pode ser normalizada.

$$\dot{a}(t) = \frac{i\beta'}{Ck} \int_{\Gamma} f(x, v, t) e^{-ikx+i\omega_0 t} R(x) dx dv, \quad (2.3.77)$$

com o campo de força

$$F(x, v, t) = R(x)\beta'\Im \left(a(t)e^{ikx-i\omega_0 t} \right) - \varepsilon' \int_{\Gamma} \partial_x U(x, x') R(x') f(x', v', t) dx' dv' R(x) \\ + \frac{\beta'}{k} \Re \left(a(t)e^{ikx-i\omega_0 t} \right) \partial_x R(x) - \varepsilon' \int_{\Gamma} U(x, x') R(x') f(x', v', t) dx' dv' \partial_x R(x). \quad (2.3.78)$$

Queremos contabilizar as partículas injetadas em Ω . Logo, além da medida de massa σ (ou σ^R), introduzimos uma medida de *fluxo de contorno* ν , no espaço (t, v) , que conta partículas sendo injetadas em Ω através de $x_1 = -\delta$ ou $x_2 = L + \delta$. De modo que, essencialmente, temos dois tipos de trajetórias para observar: (a) aquelas de partículas com condições iniciais em Γ que permanecem em Γ ; e (b) aquelas de partículas com condições iniciais fora de Γ que são injetadas em Γ em um tempo finito (note que **não** estamos interessados nas partículas após saírem de Γ , ou naquelas que não entram em Γ em um tempo finito⁷). Portanto, a evolução das trajetórias no espaço (x, v) de uma partícula é dada por um fluxo T como segue. Para o caso (a)

$$(a) \quad (x_r(t), v_r(t)) = T_{t,s} (x_r(s), v_r(s)), \quad (2.3.79)$$

descrevendo partículas evoluindo de um tempo s ao tempo t dentro de Γ . E, para (b)

$$(b) \quad (x_r(t), v_r(t)) = T_{t,t'} [T_{t',s}^0 (x_l - v_r(s)(s-t'), v_r(s))], \quad (2.3.80)$$

descrevendo partículas injetadas que, em algum tempo $t' < s$, estavam fora de Γ a uma distância $|v_r(s)t'|$ da fronteira. T^0 é o mapa do movimento livre e $l = 1, 2$. A figura 2.2 mostra, esquematicamente, a evolução das trajetórias.

Por dualidade, qualquer medida μ_s do sistema é transportada pelo fluxo, da forma

$$\mu_t = (\mu_s + \nu \circ T_{\cdot, s}^0) \circ T_{s,t} [a(\cdot), \mu], \quad (2.3.81)$$

onde introduzimos os parâmetros $a(\cdot)$ e μ no fluxo para indicar a dependência com o histórico do modo e das partículas.

⁷Estamos nos apoiando no fato de que partículas nunca entram em Ω após saírem, uma vez que a força é nula fora da região Γ .

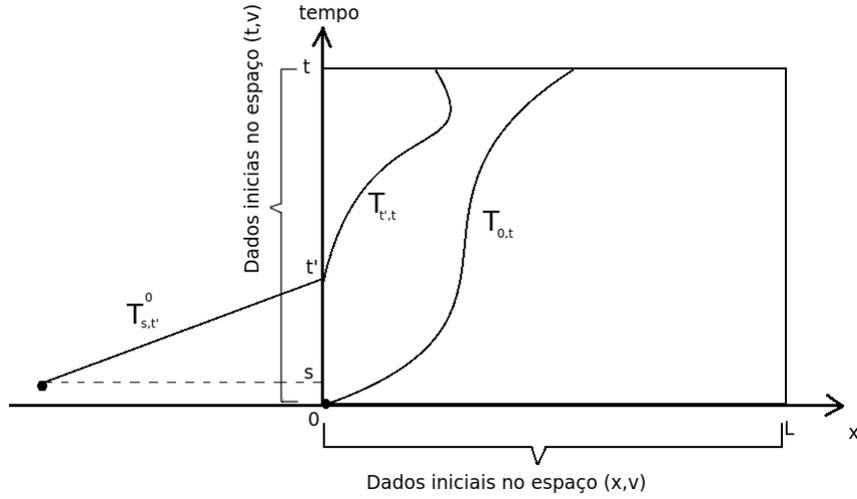


Figura 2.2: Trajetórias no espaço (x, v) . O intervalo $[0, L]$ corresponde ao espaço Ω .

Seja \mathcal{M}_+ o espaço das medidas positivas μ em Γ . Neste espaço, definimos a distância

$$d_{\Gamma, [0, T]}(\mu, \mu'; v, v') = \sup_{\phi \in \mathcal{D}} \left| \int_{\Gamma_c} \phi(x, v) d(\mu - \mu')(x, v) + \sum_{l=1}^2 \int_{\Lambda} R(x_l) \phi(x_l - vt', v) d(v - v')(t', v) \right| + \sup_{\phi \in \mathcal{D}} \left| \int_{\Gamma_\delta} R(x) \phi(x, v) d(\mu - \mu')(x, v) \right| \quad (2.3.82)$$

$$\mathcal{D} = \left\{ \phi \mid \phi \in C_b^{0,1}(\mathbb{R} \times \mathbb{R}); \|\phi\|_{uL} \leq 1 \right\}, \quad (2.3.83)$$

onde x_l são os pontos que definem a borda de Ω , $C_b^{0,1}(\mathbb{R} \times \mathbb{R})$ representa o espaço das funções limitadas e Lipschitz contínuas em $\mathbb{R} \times \mathbb{R}$ e $\|\cdot\|_{uL} \equiv \max\{\|\cdot\|_u, \lambda \text{Lip}(\cdot)\}$, sendo λ a constante que garante a dimensão correta. Dividimos o espaço Γ em duas regiões $\Gamma_c \cup \Gamma_\delta$ definidas por

$$\Gamma_c = \{(x, v) : x \in \Omega, \text{dist}(x, \partial\Omega) > \delta; v \in \mathbb{R}\} \quad (2.3.84)$$

$$\Gamma_\delta = \{(x, v) : \text{dist}(x, \partial\Omega) \leq \delta; v \cdot \mathbf{n} < 0\}, \quad (2.3.85)$$

sendo o vetor \mathbf{n} normal (e para fora) ao domínio Ω . Finalmente, introduzimos o espaço

$$\Lambda = \{(t', v) : t' \in [0, T]; v \cdot \mathbf{n} < 0\}. \quad (2.3.86)$$

Portanto, nossa distância em $\mathcal{M}_+ \times \mathcal{L}$ é dada por

$$\|(\mu_t, a(t)) - (\mu'_t, a'(t))\| \equiv d_\Gamma(\mu_t, \mu'_t) + \|a(t) - a'(t)\|. \quad (2.3.87)$$

Teorema Seja $|\partial U| \leq B_1$ e $|\partial_x U(x, x') - \partial_y U(y, x)| \leq B_2|x - y|$, com constantes reais positivas B_1 e B_2 . Dadas duas condições iniciais diferentes $(\mu_0, a(0))$ e $(\mu'_0, a'(0))$ em

$\mathcal{M}_+ \times \mathcal{Z}$, a evolução cinética gera, para qualquer tempo positivo t , os estados $(\mu_t, a(t))$ e $(\mu'_t, a'(t))$ das condições iniciais, respectivamente. Além disso, para um tempo fixo t ,

$$\|(\mu_t, a(t)) - (\mu'_t, a'(t))\| \leq e^{\xi t} \|(\mu_0, a(0)) - (\mu'_0, a'(0))\|, \quad (2.3.88)$$

para uma constante estritamente positiva ξ .

Corolário Dadas uma medida contínua $\sigma_0 \in \mathcal{M}_+$ e uma sequência de medidas pontuais $\sigma_{0N}^R \in \mathcal{M}_+$ definindo a distribuição inicial de N partículas no espaço (x, v) , de maneira que $\lim_{N \rightarrow \infty} d_\Gamma(\sigma_{0N}^R, \sigma_0) = 0$, e dado um envelope de onda inicial $a(0) \in \mathcal{Z}$, para todo tempo $0 \leq t \leq T$ considere a medida e o envelopes resultantes $(\sigma_{tN}^R, a^R(t))$ gerados por H e a solução cinética $(\sigma_t = \int f(x, v, t) dx dv, a(t))$ de (2.3.76)-(2.3.77). Logo, $\lim_{N \rightarrow \infty} d_\Gamma(\sigma_{tN}^R, \sigma_t) = 0$ e $\lim_{N \rightarrow \infty} a_N^R(t) = a(t)$.

2.3.4 Demonstração do Teorema

Nesta seção apresentamos a demonstração formal do teorema enunciado na seção anterior.

◇ **Demonstração:** Das equações (2.3.70)-(2.3.72), vemos que o movimento da partícula r é completamente descrito por seu par posição-velocidade inicial, a história do modo e a história da distribuição de partículas. Logo, podemos escrever o campo vetorial no lado direito dessas equações como

$$\frac{d}{dt}(x_r(t), v_r(t)) = \{G_c[a(t), \mu_t] + G_\delta[a(t), \mu_t]\} (x_r(t), v_r(t)), \quad (2.3.89)$$

onde G_c diz respeito aos termos proporcionais a R^0 e R^1 , enquanto G_δ diz respeito àqueles termos com o fator $\partial_x R(x)$. Logo, sabe-se de [16] que G_c tem uma constante de Lipschitz finita (que chamaremos de $\gamma_f(t)$).

Assumimos a existência de uma solução $(\mu_t, a(t))$ fracamente contínua no tempo, logo o campo vetorial também é contínuo no tempo. Portanto, considerando que o campo vetorial é Lipschitz contínuo por hipótese, o teorema de Cauchy-Lipschitz assegura que podemos escrever a evolução das trajetórias das partículas no espaço de fase por um fluxo T , de acordo com (2.3.81).

De maneira semelhante, a evolução do modo $a(t)$ é completamente determinada por sua

condição inicial $a(0)$ e a história da medida μ , definindo um fluxo S como

$$a(t) = S_{t,0}[\mu.]a(0). \quad (2.3.90)$$

Portanto, considere duas soluções do sistema (2.3.81), (2.3.90) sendo $(\mu_t, a(t))$ e $(\mu'_t, a'(t))$. Adotaremos, por facilidade de notação, a seguinte convenção

$$T_{.,0}^0 \longrightarrow T^0. \quad (2.3.91)$$

Em algum instante t , a distância entre essas soluções é dada por

$$\begin{aligned} \|(\mu_t, a(t)) - (\mu'_t, a'(t))\| = & d_{\Gamma,[0,T]}((\mu_0 + v. \circ T^0) \circ T_{0,t}[a(.), \mu.], (\mu'_0 + v'. \circ T^0) \circ T_{0,t}[a'(.), \mu'.]) \\ & + \|S_{t,0}[\mu.]a(0) - S_{t,0}[\mu'.]a'(0)\| \quad (2.3.92) \end{aligned}$$

Procedemos, agora, a encontrar uma majoração para esta última expressão. Aplicando a desigualdade triangular separadamente em cada termo do lado direito da equação (2.3.92)

$$\|S_{t,0}[\mu.]a(0) - S_{t,0}[\mu'.]a'(0)\| \leq d_1(t) + d_2(t) \quad (2.3.93)$$

$$d_{\Gamma,[0,T]}((\mu_0 + v. \circ T^0) \circ T_{0,t}[a(.), \mu.], (\mu'_0 + v'. \circ T^0) \circ T_{0,t}[a'(.), \mu'.]) \leq d_3(t) + d_4(t) \quad (2.3.94)$$

com as definições

$$d_1(t) = \|S_{t,0}[\mu.]a(0) - S_{t,0}[\mu'.]a'(0)\| \quad (2.3.95)$$

$$d_2(t) = \|S_{t,0}[\mu.]a'(0) - S_{t,0}[\mu'.]a'(0)\| \quad (2.3.96)$$

$$d_3(t) = d_{\Gamma,[0,T]}((\mu_0 + v. \circ T^0) \circ T_{0,t}[a(.), \mu.], (\mu'_0 + v'. \circ T^0) \circ T_{0,t}[a(.), \mu.]) \quad (2.3.97)$$

$$d_4(t) = d_{\Gamma,[0,T]}((\mu'_0 + v'. \circ T^0) \circ T_{0,t}[a(.), \mu.], (\mu'_0 + v'. \circ T^0) \circ T_{0,t}[a'(.), \mu'.]) \quad (2.3.98)$$

Precisamos estimar as distâncias $d_i(t)$. A soma $d_1(t) + d_3(t)$ representa a distância entre estados evoluindo no mesmo *ambiente* com mesma condição inicial, enquanto a soma $d_2(t) + d_4(t)$ é a distância entre estados que evoluem com vínculos diferentes mas com mesma condição inicial.

Por simplicidade, adotaremos, onde necessário, as seguintes convenções

$$G_c[a(t), \mu_t] \longrightarrow G_c(t) \quad : \quad G_c[a'(t), \mu'_t] \longrightarrow G'_c(t) \quad (2.3.99)$$

$$T_{s,t}[a(.), \mu.] \longrightarrow T_{s,t}[\cdot] \quad : \quad T_{s,t}[a'(.), \mu'.] \longrightarrow T'_{s,t}[\cdot]. \quad (2.3.100)$$

- Integração de (2.3.72) mostra, de maneira direta⁸, que

$$d_1(t) = d_1(0) = \|a(0) - a'(0)\| \quad (2.3.101)$$

- Para estimar $d_2(t)$ precisamos integrar (2.3.72) com a lado direito dado por medidas diferentes

$$\begin{aligned} d_2(t) &= \left| \frac{\zeta \beta'}{Ck} \int_0^t \int_{\Gamma} e^{-ikx+i\omega_0 t} R(x) d(\mu_s - \mu'_s) ds \right| \\ &= \left| \frac{2\zeta \beta' z}{Ck} \int_0^t \int_{\Gamma} R(x) \frac{(\cos(kx - \omega_0 t) - i \sin(kx - \omega_0 t))}{2z} d(\mu_s - \mu'_s) ds \right| \\ &\leq z \beta' \int_0^t d_{\Gamma}(\mu_s, \mu'_s) ds \end{aligned} \quad (2.3.102)$$

onde z é escolhido como sendo finito e com a condição

$$\frac{2\zeta}{C} \max\left(\frac{1}{k}, \lambda\right) \leq z, \quad (2.3.103)$$

assegurando que o integrando em (2.3.103) $\in \mathcal{D}$. Aqui, d_{Γ} corresponde à parte de $d_{\Gamma, [0, T]}(\cdot, \cdot)$ que diz respeito à integração em Γ .

- Como assumimos que o campo vetorial $G = G_c + G_{\delta}$ tem constante de Lipschitz $\gamma(t)$, podemos notar que o fluxo $T_{0,t}[a(\cdot), \mu.]$ tem constante de Lipschitz $\exp \int_0^t \gamma(s) ds$. Logo,

$$\begin{aligned} d_3(t) &= \sup_{\phi \in \mathcal{D}} \left| \int_{\Gamma_c} d(\mu_0 - \mu'_0) \phi \circ T_{t,0}[a(\cdot), \mu.] + \sum_{l=1}^2 \int_{\Lambda} d(v. - v'.) \circ T^0 R(x) \phi \circ T_{t,0}[a(\cdot), \mu.] \right| \\ &+ \sup_{\phi \in \mathcal{D}} \left| \int_{\Gamma_{\delta}} R(x) d(\mu_0 - \mu'_0) \phi \circ T_{t,0}[a(\cdot), \mu.] \right| \\ &\leq e^{\int_0^t \gamma(s) ds} d(\mu_0, \mu'_0) \end{aligned} \quad (2.3.104)$$

⁸O fluxo S é apenas uma translação em \mathcal{L} .

- Finalmente, escrevemos o último termo explicitamente

$$\begin{aligned}
d_4(t) \leq & \overbrace{\sup_{\phi \in \mathcal{D}} \left| \int_{\Gamma_c} d\mu'_0 (\phi \circ T_{t,0}[a(\cdot), \mu_\cdot] - \phi \circ T_{t,0}[a'(\cdot), \mu'_\cdot]) \right|}^{(i)} \\
& + \overbrace{\sup_{\phi \in \mathcal{D}} \left| \sum_{l=1}^2 \int_{\Lambda} d(v' \circ T^0) R(x) (\phi \circ T_{t,0}[a(\cdot), \mu_\cdot] - \phi \circ T_{t,0}[a'(\cdot), \mu'_\cdot]) \right|}^{(ii)} \\
& + \overbrace{\sup_{\phi \in \mathcal{D}} \left| \int_{\Gamma_\delta} R(x) d\mu'_0 (\phi \circ T_{t,0}[a(\cdot), \mu_\cdot] - \phi \circ T_{t,0}[a'(\cdot), \mu'_\cdot]) \right|}^{(iii)} \quad (2.3.105)
\end{aligned}$$

Vamos proceder a estimar cada um destes termos (nomeados (i),(ii) e (iii)) separadamente:

- (i) Definindo $w = (x, v)$, o primeiro termo é limitado por ⁹

$$\begin{aligned}
& \int_{\Gamma_c} d\mu'_0 \quad \lambda^{-1} |T_{t,0}[a(\cdot), \mu_\cdot]w - T_{t,0}[a'(\cdot), \mu'_\cdot]w| \\
= & \int_{\Gamma_c} d\mu'_0 \quad \lambda^{-1} \left\| \int_0^t (G_c[a(s), \mu_s]T_{s,0}[a(\cdot), \mu_\cdot]w - G_c[a'(s), \mu'_s]T_{s,0}[a'(\cdot), \mu'_\cdot]w) ds \right\| \quad (2.3.106)
\end{aligned}$$

Por triangularidade, esta equação é limitada pela soma

$$d_{41}(t) + d_{42}(t), \quad (2.3.107)$$

dados que

$$d_{41}(t) = \int_{\Gamma_c} d\mu'_0 \lambda^{-1} \int_0^t \|G_c[a(s), \mu_s]T_{s,0}[a(\cdot), \mu_\cdot]w - G_c[a(s), \mu_s]T_{s,0}[a'(\cdot), \mu'_\cdot]w\| ds \quad (2.3.108)$$

$$d_{42}(t) = \int_{\Gamma_c} d\mu'_0 \lambda^{-1} \int_0^t \|G_c[a(s), \mu_s]T_{s,0}[a'(\cdot), \mu'_\cdot]w - G_c[a'(s), \mu'_s]T_{s,0}[a'(\cdot), \mu'_\cdot]w\| ds \quad (2.3.109)$$

Usando a condição de Lipschitz de G_c , encontramos que

$$d_{41}(t) \leq \int_0^t \gamma_f(s) (d_{41}(s) + d_{42}(s)) ds. \quad (2.3.110)$$

O segundo termo de (2.3.107) pode ser reescrito como

$$d_{42}(t) = \lambda^{-1} \int_0^t \int_{\Gamma_c} d\mu_s^{\Omega} \overbrace{\|G_c[a(s), \mu_s](w) - G_c[a'(s), \mu'_s](w)\|}^{\equiv A_c} ds, \quad (2.3.111)$$

⁹O termo λ^{-1} vem da definição de \mathcal{D} .

em que a definição de $\mu_s'^{\Omega}$ é idêntica à da equação (2.3.34).

Para avaliar o integrando, lembramos da definição (2.3.74),

$$\begin{aligned} A_c &= 0 + \alpha\tau \left| \dot{v}(a(s), \mu_s) - \dot{v}(a'(s), \mu'_s) \right| \\ &= \alpha\tau \left| \frac{\beta'}{2i} (a(s)e^{ikx-i\omega_0s} - a^*(s)e^{-ikx+i\omega_0s}) - \int_{\Gamma} \varepsilon' \partial_x U(x, x') R(x') d\mu_s(x') \right. \\ &\quad \left. - \frac{\beta'}{2i} (a'(s)e^{ikx-i\omega_0s} - a'^*(s)e^{-ikx+i\omega_0s}) + \int_{\Gamma} \varepsilon' \partial_x U(x, x') R(x') d\mu'_s(x') \right| \end{aligned} \quad (2.3.112)$$

$$\begin{aligned} &= \alpha\tau \left| \varepsilon' \int_{\Gamma} \partial_x U(x, x') R(x') d(\mu_s - \mu'_s)(x') + \beta' \Im[(a(s) - a'(s))e^{ikx-i\omega_0s}] \right| \\ &\leq \alpha\tau b d_{\Gamma}(\mu_s, \mu'_s) + \frac{\alpha\tau\beta'}{\zeta} \|a(s) - a'(s)\|, \end{aligned} \quad (2.3.113)$$

dado

$$b \geq \frac{1}{\varepsilon'} \max \{B_1, \lambda B_2\}. \quad (2.3.114)$$

Substituindo (2.3.113) em (2.3.111),

$$d_{42}(t) \leq \lambda^{-1} \int_0^t \left(\int_{\Gamma_c} d\mu_s'^{\Omega} \right) \left\{ \alpha\tau b d_{\Gamma}(\mu_s, \mu'_s) + \frac{\alpha\tau\beta'}{\zeta} \|a(s) - a'(s)\| \right\} ds. \quad (2.3.115)$$

De maneira semelhante, o termo (iii) na expressão (2.3.105) tem um limite superior dado por

$$\delta_{41}(t) + \delta_{42}(t), \quad (2.3.116)$$

onde

$$\begin{aligned} \delta_{41}(t) &= \int_{\Gamma_{\delta}} d\mu'_0 \lambda^{-1} R(x) \int_0^t \|G_c[a(s), \mu_s] T_{s,0}[a(\cdot), \mu \cdot] w \\ &\quad - G_c[a(s), \mu_s] T_{s,0}[a'(\cdot), \mu' \cdot] w\| ds \end{aligned} \quad (2.3.117)$$

$$\begin{aligned} \delta_{42}(t) &= \int_{\Gamma_{\delta}} d\mu'_0 \lambda^{-1} R(x) \int_0^t \|G_c[a(s), \mu_s] T_{s,0}[a'(\cdot), \mu' \cdot] w \\ &\quad - G_c[a'(s), \mu'_s] T_{s,0}[a'(\cdot), \mu' \cdot] w\| ds. \end{aligned} \quad (2.3.118)$$

Analogamente a (2.3.110),

$$\delta_{41}(t) \leq \int_0^t \gamma(s) (\delta_{41}(s) + \delta_{42}(s)) ds. \quad (2.3.119)$$

Reescrevemos (2.3.118) como

$$\delta_{42}(t) = \lambda^{-1} \int_0^t \int_{\Gamma_{\delta}} d\mu_s'^{\Omega} \overbrace{\|G(s)(w) - G'_c(s)(w)\|}^{\equiv A_{\delta}} ds, \quad (2.3.120)$$

e obtemos a majoração

$$\begin{aligned}
A_\delta \leq & \alpha\tau \left| \beta' R(x) \Im \left((a(s) - a'(s)) e^{ikx - i\omega_0 s} \right) - \varepsilon' \int_\Gamma \partial_x U(x - x') R(x') R(x) d(\mu_s - \mu'_s)(x') \right| \\
& + \alpha\tau \underbrace{\left| \beta' k^{-1} \Re \left((a(s) - a'(s)) e^{ikx - i\omega_0 s} \right) \partial_x R(x) \right|}_{(a)} \\
& + \alpha\tau \underbrace{\left| \varepsilon' \int_\Gamma U(x - x') R(x') \partial_x R(x) d(\mu_s - \mu'_s)(x') \right|}_{(b)}.
\end{aligned} \tag{2.3.121}$$

Os dois primeiros termos do lado direito dessa desigualdade são limitados superiormente por seus valores em $R(x) = 1$. Fazendo isso, a expressão para os dois primeiros termos fica idêntica àquela para a desigualdade (2.3.112). Logo, esses termos são limitados pelo valor dado em (2.3.113).

Para qualquer $z \in \mathbb{C}$, sabe-se que $\Re(z) \leq |z|$, logo, vemos que

$$(a) : \leq \beta' k^{-1} |a(s) - a'(s)| |\partial_x R(x)| = \frac{\beta' k^{-1}}{\zeta} \|a(s) - a'(s)\|. \tag{2.3.122}$$

Para encontrar uma majoração para (b), assumimos que o potencial é Lipschitz contínuo, com constantes B_{1U} e B_{2U} definidas por

$$|U| \leq B_{1U}, \quad |U(x, x') - U(y, x')| \leq B_{2U} |x - y|. \tag{2.3.123}$$

Portanto, de maneira análoga à majoração do primeiro termo na expressão (2.3.113),

$$\begin{aligned}
(b) : & = \left| \varepsilon' \partial_x R(x) \int_\Gamma U(x - x') R(x') d(\mu_s - \mu'_s)(x') \right| \\
& \leq b_u d_\Gamma(\mu_s, \mu'_s),
\end{aligned} \tag{2.3.124}$$

onde

$$b_u \equiv \frac{1}{\varepsilon'} \max \{B_{1U}, \lambda B_{2U}\}. \tag{2.3.125}$$

Usando as majorações (2.3.122) e (2.3.124), temos

$$\begin{aligned}
\delta_{42}(t) \leq & \lambda^{-1} \alpha\tau \int_0^t \int_{\Gamma_\delta} d\mu'_s{}^\Omega \left[\left(b d_\Gamma(\mu_s, \mu'_s) + \frac{\beta'}{\zeta} \|a(s) - a'(s)\| \right) \right. \\
& \left. + |\partial_x R(x)| \left(b_U d_\Gamma(\mu_s, \mu'_s) + \frac{\beta' k^{-1}}{\zeta} \|a(s) - a'(s)\| \right) \right] ds.
\end{aligned} \tag{2.3.126}$$

Exigimos, ainda, que a massa total do sistema, composta da massa inicial mais a massa

injetada em tempos $t \in [0, T]$, seja finita, i.e. ,

$$\int_{\Gamma_c} d\mu_s'^{\Omega} = M_c < \infty, \quad \int_{\Gamma_\delta} d\mu_s'^{\Omega} + \sum_{l=1}^2 \int_{\Lambda} T_{s,0}[\cdot] d(\mathbf{v} \circ T^0) = M_\delta < \infty. \quad (2.3.127)$$

Finalmente, coletando os resultados dados pelas expressões (2.3.101), (2.3.103), (2.3.104), (2.3.105), (2.3.110), (2.3.115), (2.3.119) e (2.3.126), obtemos

$$\begin{aligned} \|(\mu_t, a(t)) - (\mu_t', a'(t))\| &\leq \|a(0) - a'(0)\| + z\beta' \int_0^t d_\Gamma(\mu_s, \mu_s') ds \\ &\quad + e^{\int_0^t \gamma(s) ds} d(\mu_0, \mu_0') + \int_0^t \gamma_f(s) (d_{41}(s) + d_{42}(s)) ds \\ &\quad + \lambda^{-1} M_c \int_0^t \alpha \tau \left(b d_\Gamma(\mu_s, \mu_s') + \frac{\beta'}{\zeta} \|a(s) - a'(s)\| \right) ds \\ &\quad + \int_0^t \gamma(s) (\delta_{41}(s) + \delta_{42}(s)) ds \\ &\quad + \lambda^{-1} \alpha \tau \int_0^t \left[M_\delta \left(b d_\Gamma(\mu_s, \mu_s') + \frac{\beta'}{\zeta} \|a(s) - a'(s)\| \right) \right. \\ &\quad \left. + \rho_\delta \left(b_U d_\Gamma(\mu_s, \mu_s') + \frac{\beta' k^{-1}}{\zeta} \|a(s) - a'(s)\| \right) \right] ds, \end{aligned}$$

onde definimos a “densidade”

$$\rho_\delta = \int_{\Gamma_\delta} d\mu_s'^{\Omega} |\partial_x R(x)| < \infty. \quad (2.3.128)$$

Podemos introduzir as quantidades

$$D_1(t) := \|(\mu_t, a(t)) - (\mu_t', a'(t))\| + e^{\int_0^t \gamma(s) ds} d(\mu_0, \mu_0') \quad (2.3.129)$$

$$D_2(t) := d_2(t) + \underbrace{(d_{41}(t) + \delta_{41}(t))}_{\equiv \Delta_1} + \underbrace{(d_{42}(t) + \delta_{42}(t))}_{\equiv \Delta_2}, \quad (2.3.130)$$

para encontrar a forma final da majoração da maneria

$$\|(\mu_t, a(t)) - (\mu_t', a'(t))\| \leq D_1(t) + D_2(t). \quad (2.3.131)$$

Seja $M_T = M_c + M_\delta + k^{-1} \rho_\delta$ e redefina $b_U := b_U k$. Portanto

$$\begin{aligned} D_2(t) &\leq \int_0^t \{ z\beta' d_\Gamma(\mu_s, \mu_s') + \gamma(s) (\Delta_1(s) + \Delta_2(s)) \\ &\quad + \lambda^{-1} M_T \alpha \tau (b' d_\Gamma(\mu_s, \mu_s') + \beta' \zeta^{-1} \|a(s) - a'(s)\|) \} ds, \end{aligned} \quad (2.3.132)$$

onde

$$b' = \max \{ b, b_U \}. \quad (2.3.133)$$

Para facilitar a notação, introduzimos as constantes

$$\begin{aligned} A &\equiv \alpha \tau M_T \lambda^{-1}, \\ z' &\equiv \max \{z\beta', Ab'\} \text{ e} \\ z'' &\equiv \max \left\{ \frac{A\beta'}{\zeta}, z' \right\}. \end{aligned} \quad (2.3.134)$$

Note,

$$d_\Gamma(\mu_s, \mu'_s) \leq d_3(s) + d_4(s) \quad (2.3.135)$$

para termos

$$\begin{aligned} D_2(t) &\leq \int_0^t \left\{ \gamma(s)(\Delta_1(s) + \Delta_2(s)) + \frac{A\beta'}{\zeta} \|a(s) - a'(s)\| + z'(d_3(s) + \Delta_1(s) + \Delta_2(s)) \right\} ds \\ &\leq \int_0^t \{(\gamma(s) + z')D_2(s) + z''D_1(s)\} ds. \end{aligned} \quad (2.3.136)$$

Usando o lema de Gronwall nesta expressão, obtemos

$$D_2(t) \leq \int_0^t z'' D_1(s) e^{\int_s^t (z' + \gamma(r)) dr} ds. \quad (2.3.137)$$

Portanto, temos

$$\begin{aligned} \|(\mu_t, a(t)) - (\mu'_t, a'(t))\| &\leq \|a(0) - a'(0)\| + e^{\int_0^t \gamma(s) ds} d(\mu_0, \mu'_0) \\ &\quad + \int_0^t z'' D_1(s) e^{\int_s^t (z' + \gamma(r)) dr} ds. \end{aligned} \quad (2.3.138)$$

Definindo

$$\gamma' = \sup_{0 \leq s \leq t} \gamma(s), \quad (2.3.139)$$

obtemos

$$\begin{aligned} \|(\mu_t, a(t)) - (\mu'_t, a'(t))\| &\leq \|a(0) - a'(0)\| + e^{\gamma' t} d(\mu_0, \mu'_0) + \int_0^t z'' D_1(s) e^{(z' + \gamma')(t-s)} ds \\ &\leq \|a(0) - a'(0)\| + e^{\gamma' t} d(\mu_0, \mu'_0) \\ &\quad + \left(\|a(0) - a'(0)\| + e^{\gamma' t} d(\mu_0, \mu'_0) \right) z'' \int_0^t e^{(z' + \gamma')(t-s)} ds \\ &\leq \|a(0) - a'(0)\| + e^{\gamma' t} d(\mu_0, \mu'_0) \\ &\quad + \frac{z''}{z' + \gamma'} \left(\|a(0) - a'(0)\| + e^{\gamma' t} d(\mu_0, \mu'_0) \right) e^{(z' + \gamma')t} \\ &\leq q \left(\|a(0) - a'(0)\| + e^{\gamma' t} d(\mu_0, \mu'_0) \right) e^{(z' + \gamma')t}, \end{aligned} \quad (2.3.140)$$

onde

$$q = \max \left(1, \frac{z''}{z' + \gamma'} \right).$$

A expressão (2.3.140) garante a unicidade da solução da equação (2.3.81).

Precisamos, ainda, mostrar que a evolução (2.3.81), (2.3.90) admite uma solução fracamente contínua $(\mu, a(\cdot))$ em um intervalo arbitrário de tempo $[0, T]$.

Para tal, no espaço $C_{\mathcal{F}}$ de medidas fracamente contínuas dependentes do tempo em \mathcal{F} , definimos a distância

$$d_{\kappa}(\mu, \mu') := \sup_{t \in [0, T]} d_{\Gamma, [0, T]}(\mu_t, \mu'_t) e^{-\kappa t}, \quad (2.3.141)$$

para qualquer $\kappa > 0$ real e $T < \infty$.

Da mesma forma, no espaço $C_{\mathcal{Z}}$ das funções contínuas em \mathcal{Z} , definimos a distância

$$\|a(\cdot) - a'(\cdot)\|_{\kappa} := \sup_{t \in [0, T]} \|a(t) - a'(t)\| e^{-\kappa t}. \quad (2.3.142)$$

Considere o esquema de iterações

$$\begin{cases} \mu_t^{(n+1)} = (\mu_t^{(0)} + \mathbf{v} \circ T_{\cdot, 0}^0) \circ T_{0, t}[a^{(n)}(\cdot), \mu_{\cdot}^{(n)}] \\ a^{(n+1)}(t) = S_{t, 0}[\mu_{\cdot}^{(n)}]a^{(0)}(t), \end{cases} \quad (2.3.143)$$

onde $a^{(0)}(t) = a(0)$ e $\mu_t^{(0)} = \mu_0$. Para algum instante $t \in [0, T]$ e $n \geq 1$, usamos a expressão (2.3.137) para obter

$$\begin{aligned} \|a^{(n+1)}(t) - a^{(n)}(t)\| + d_{\Gamma, [0, T]}(\mu_t^{(n+1)}, \mu_t^{(n)}) &\leq \int_0^t \left\{ z' d_{\Gamma}(\mu_s^{(n)}, \mu_s^{(n-1)}) \right. \\ &\quad \left. + \left[z'' e^{(z' + \gamma')(t-s)} \left(d_{\Gamma}(\mu_s^{(n)}, \mu_s^{(n-1)}) + \|a^{(n)}(s) - a^{(n-1)}(s)\| \right) \right] \right\} ds. \end{aligned} \quad (2.3.144)$$

Usando as definições (2.3.141) e (2.3.142) na desigualdade (2.3.144), após algumas manipulações algébricas obtemos

$$\begin{aligned} d_{\kappa}(\mu_{\cdot}^{(n+1)}, \mu_{\cdot}^{(n)}) + \|a^{(n+1)}(\cdot) - a^{(n)}(\cdot)\|_{\kappa} &\leq \frac{z'}{\kappa} d_{\kappa}(\mu_{\cdot}^{(n)}, \mu_{\cdot}^{(n-1)}) + \frac{z''}{\kappa - (z' + \gamma')} d_{\kappa}(\mu_{\cdot}^{(n)}, \mu_{\cdot}^{(n-1)}) \\ &\quad + \frac{z''}{\kappa - (z' + \gamma')} \|a^{(n)}(\cdot) - a^{(n-1)}(\cdot)\|_{\kappa}, \end{aligned} \quad (2.3.145)$$

escolhendo κ maior do que a constante $(z' + \gamma')$.

Usando as definições (2.3.134), vemos que

$$\frac{z''}{\kappa - (z' + \gamma')} \geq \frac{z'}{\kappa}. \quad (2.3.146)$$

logo, podemos usar a majoração

$$d_{\kappa}(\mu_{\cdot}^{(n+1)}, \mu_{\cdot}^{(n)}) + \|a^{(n+1)}(\cdot) - a^{(n)}(\cdot)\|_{\kappa} \leq \frac{z''}{\kappa - (z' + \gamma')} \left[2d_{\kappa}(\mu_{\cdot}^{(n)}, \mu_{\cdot}^{(n-1)}) + \|a^{(n)}(\cdot) - a^{(n-1)}(\cdot)\|_{\kappa} \right]. \quad (2.3.147)$$

Uma escolha apropriada da constante arbitrária κ garante que o mapa iterativo seja uma contração. Logo, o teorema do ponto fixo garante que o esquema (2.3.143) converge para um único ponto fixo.

Este último resultado completa a demonstração do teorema. O corolário pode ser obtido ao notarmos que a desigualdade (2.3.88) pode ser aplicada ao par de soluções $(\sigma_{tN}^R, a^R(t))$ gerado por H , e $(\sigma_t = f(x, v, t) dx dv, a(t))$ gerado por (2.3.76)-(2.3.77). \square

3 *Limite de espectro denso - Abordagem estocástica*

O movimento de uma partícula carregada na presença de um campo eletrostático dependente do tempo é um paradigma para diversos fenômenos fundamentais na física de plasmas não-colisional [11]. A presença deste campo leva à propagação de modos coletivos no plasma e a natureza de longo alcance das interações Coulombianas entre partículas nos permite utilizar modelos de campo médio [13] para descrever a dinâmica do sistema. O modelo dinâmico de onda-partícula apresentado nos capítulos anteriores descreve esses fenômenos microscopicamente, permitindo o controle sobre o número de partículas e ondas (modos coletivos) no sistema.

Quando o número de partículas é grande o suficiente, a contribuição do movimento de uma única partícula para os campos coletivos pode ser desprezada, e estes podem ser considerados como dados. Nesse caso, o efeito de uma onda em uma única partícula é o de reduzir a velocidade relativa entre sua própria velocidade de fase e a velocidade da partícula [20, 50]. Quando duas ondas competem por esse processo de sincronização, podemos calcular a dinâmica da partícula perturbativamente, se a sobreposição das ondas for fraca o suficiente. Se a sobreposição for considerável, a dinâmica se torna caótica, e podemos tentar substituir a força em uma partícula teste por um *ruído branco* gaussiano.

Neste capítulo, trabalharemos em uma dimensão espacial no limite de espectro denso, em que a sobreposição das ondas é considerável, e usaremos uma descrição probabilística da dinâmica das partículas teste. Portanto, como estamos interessados na evolução de uma partícula, utilizaremos a descrição dinâmica do sistema, substituindo a amplitude dos modos coletivos por variáveis aleatórias. Escrevendo o campo eletrostático na próxima seção, mostramos que, no limite de um número infinito de ondas e partículas, a velocidade de uma partícula teste converge a um processo de Wiener no intervalo de tempo $[0, 2\pi[$ [20].

Na Seção 3.2, provamos, formalmente, a existência e unicidade da solução da equação diferencial estocástica que descreve a dinâmica da partícula no campo de muitas ondas com

amplitudes e fases aleatórias para tempos finitos. Mostramos que, se focamos na evolução da velocidade da partícula ao invés do vetor (posição, velocidade), obtemos uma menor taxa de crescimento da distância entre soluções no *espaço das funções*. De fato, a posição da partícula pode ser obtida diretamente de sua velocidade, logo ter uma expressão para a velocidade da partícula é descrever por completo sua dinâmica.

Apresentamos resultados numéricos na Seção 3.3, em que usamos um integrador simplético de segunda ordem para realizar um esquema de iteração de Picard para a evolução da velocidade da partícula teste. Mostramos que nossas estimativas analíticas são “pessimistas” comparadas aos resultados numéricos, o que é esperado uma vez que fazemos várias aproximações para limitar a distância entre soluções.

3.1 Equações de movimento

Considere o movimento de uma partícula teste na presença de ondas eletrostáticas dado por [20]

$$\begin{aligned} dq_N^M &= \frac{\mathcal{A}}{m} p_N^M dt, \\ dp_N^M &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \sum_{m=-M}^M A_{m,n} \sin(k_{m,n} q_N^M(t) - \omega_{m,n} t + \phi_{m,n}) dt, \end{aligned} \quad (3.1.1)$$

onde (q_N^M, p_N^M) é o par posição, momento da partícula observada, \mathcal{A} é uma constante de escala global de amplitude para as ondas, m é a massa da partícula, $k_{m,n}$ são os vetores de onda associados às frequências $\omega_{m,n}$ por uma relação de dispersão e $(A_{m,n}, \phi_{m,n})$ são variáveis aleatórias relacionadas a cada amplitude e fase das ondas, respectivamente. Neste trabalho, tomaremos $k_{m,n} = 1$ e $\omega_{m,n} = (m + \sigma_n)$ para todo par m, n , onde $\sigma_n \in [0, 1]$.

A equação de evolução do momento pode ser escrita em termos do processo

$$U_N = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N u_n^M(t), \quad (3.1.2)$$

onde

$$u_n^M(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \int_0^t \sum_{m=-M}^M \alpha_{m,n} e^{-i(m+\sigma_n)s} ds, \quad (3.1.3)$$

com a variável aleatória

$$\alpha_{m,n} = A_{m,n} e^{i\phi_{m,n}}, \quad (3.1.4)$$

na forma

$$dp_N^M = \sqrt{2\pi} [\sin(q_N^M(t)) d\Re U_N^M(t) + \cos(q_N^M(t)) d\Im U_N^M(t)]. \quad (3.1.5)$$

Dizemos que as variáveis aleatórias $\alpha_{m,n}$ satisfazem a condição (S4) se

1. elas são independentes e simétricas ($\mathbb{E}\alpha^k = 0$ para k ímpar),
2. $\mathbb{E}A_{m,n}^2 = 1$,
3. $\sup_{m,n} \mathbb{E}A_{m,n}^4 \leq C_4$ para alguma constante positiva C_4 ,
4. $\alpha_{m,n}^2$ é simétrica.

Se $\alpha_{m,n}$ satisfaz a condição (S4), no limite $N, M \rightarrow \infty$, o processo U_N^M se aproxima de um processo de Wiener em \mathbb{C} (ver [20]). Logo, neste limite podemos escrever

$$\begin{aligned} dQ &= \frac{\mathcal{A}}{m} P dt \\ dP &= \sqrt{2\pi} [\sin(Q(t)) \circ d\Re U(t) + \cos(Q(t)) \circ d\Im U(t)] \\ Q(0) &= q_0, \quad P(0) = p_0, \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

onde $\circ d$ representa uma diferencial de Stratonovich [37] e U é um processo de Wiener complexo. Em nosso caso, a solução de Stratonovich coincide com a de Ito [20], portanto, adotaremos a notação de Ito para aproveitar suas propriedades de isometria.

3.2 Existência e Unicidade de Soluções

Usando diferenciais de Ito, o sistema (3.1.6) pode ser escrito na forma vetorial como

$$dX_t = b(t, X_t)dt + \sigma'(t, X_t)dU(t), \quad (3.2.1)$$

dados

$$X_t = \begin{pmatrix} Q(t) \\ P(t) \end{pmatrix}, \quad b(t, X_t) = \begin{pmatrix} \frac{\mathcal{A}}{m} P \\ 0 \end{pmatrix}, \quad dU_t = \begin{pmatrix} d\Re U(t) \\ d\Im U(t) \end{pmatrix} \quad (3.2.2)$$

e

$$\sigma'(t, X_t) = (2\pi)^{1/2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \sin Q & \cos Q \end{pmatrix}. \quad (3.2.3)$$

Para mostrarmos a unicidade das soluções da equação (3.2.1), considere duas soluções diferentes X_t e \hat{X}_t com respectivas condições iniciais $X_0 = Z$ e $\hat{X}_0 = \hat{Z}$. Seja

$$a(s) = b(s, X_s) - b(s, \hat{X}_s) \quad (3.2.4)$$

$$\gamma'(s) = \sigma'(s, X_s) - \sigma'(s, \hat{X}_s), \quad (3.2.5)$$

de forma que a expectativa

$$\mathbb{E}[|X_t - \hat{X}_t|^2] = \mathbb{E}\left[\left|Z - \hat{Z} + \int_0^t a ds + \int_0^t \gamma dU_s\right|^2\right] \quad (3.2.6)$$

é limitada por

$$\mathbb{E}[|X_t - \hat{X}_t|^2] \leq 3\mathbb{E}[|Z_t - \hat{Z}_t|^2] + 3\mathbb{E}\left[\left|\int_0^t a(s)ds\right|^2\right] + 3\mathbb{E}\left[\left|\int_0^t \gamma(s)dU_s\right|^2\right] \quad (3.2.7)$$

$$\mathbb{E}[|X_t - \hat{X}_t|^2] \leq 3\mathbb{E}[|Z_t - \hat{Z}_t|^2] + 3(1+t)L^2 \int_0^t \mathbb{E}[|X_s - \hat{X}_s|^2] ds. \quad (3.2.8)$$

No último passo, usamos a propriedade de isometria da integral de Ito [37] e a condição de Lipschitz

$$|b(t, x) - b(t, y)| + |\sigma'(t, x) - \sigma'(t, y)| \leq L|x - y|, \quad (3.2.9)$$

onde L é uma constante real e positiva.

Definindo

$$A(t) = \mathbb{E}[|X_t - \hat{X}_t|^2], \quad (3.2.10)$$

escrevemos

$$A(t) \leq F + B \int_0^t A(s) ds, \quad (3.2.11)$$

onde

$$F = 3A(0) \quad (3.2.12)$$

$$B = 3(1+T)L^2, \quad (3.2.13)$$

com T sendo um limite finito ao tempo t .

Usando o lema de Gronwall, temos

$$A(t) \leq F \exp(Bt). \quad (3.2.14)$$

Se $Z = \hat{Z}$, então $F = 0$ e $A(t) = 0$ para todo $t \in [0, T]$. A unicidade segue diretamente.

Ao invés de seguirmos para a demonstração da existência de soluções, mudamos a abordagem para melhorar a estimativa (3.2.14), cujo lado direito cresce, para tempos da ordem de T , com $\sim \exp(T^2)$.

Escrevendo as equações (3.1.6) com diferenciais de Ito,

$$\begin{aligned} dQ &= \frac{\mathcal{A}}{m} P dt \\ dP &= \sqrt{2\pi} [\sin(Q(t)) d\Re U(t) + \cos(Q(t)) d\Im U(t)] \\ Q(0) &= q_0, \quad P(0) = p_0. \end{aligned} \quad (3.2.15)$$

Deste sistema,

$$Q(t) = q_0 + \int_0^t \frac{\mathcal{A}}{m} P(s) ds \equiv Q(t, P). \quad (3.2.16)$$

Logo, a equação de interesse pode ser considerada como

$$dP_t = \sigma(t, P_t) dU_t, \quad (3.2.17)$$

onde

$$\sigma(t, P_t) = \begin{pmatrix} \sin Q(t, P_t) \\ \cos Q(t, P_t) \end{pmatrix}. \quad (3.2.18)$$

Para esta equação, temos o

Teorema 3.2.1 *Dadas duas condições iniciais diferente P_0 e \hat{P}_0 em \mathbb{R} , a equação de evolução (3.2.17) gera, para qualquer tempo positivo t , os estados P_t e \hat{P}_t , respectivamente. Além disso, para um tempo fixo $t < T < \infty$*

$$A(t) \leq 2A(0)e^{\sqrt{2T}(\mathcal{A}/m)t}, \quad (3.2.19)$$

onde $A(t) \equiv \mathbb{E}[|P_t - \hat{P}_t|^2]$.

◇ **Demonstração:** Considere duas soluções à equação (3.2.17) P_t e \hat{P}_t com condições iniciais P_0 e \hat{P}_0 no espaço dos momentos e mesmas posições iniciais. Definimos a função

$$\gamma(t) = \sigma(t, P_t) - \sigma(t, \hat{P}_t). \quad (3.2.20)$$

Como antes, procuramos um limite para a expectativa

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[|P_t - \hat{P}_t|^2] &= \mathbb{E} \left[\left| P_0 - \hat{P}_0 + \int_0^t \gamma(s) dU_s \right|^2 \right] \\ &\leq 2\mathbb{E} \left[|P_0 - \hat{P}_0|^2 \right] + 2\mathbb{E} \left[\int_0^t |\gamma|^2 ds \right], \end{aligned} \quad (3.2.21)$$

onde, novamente, usamos a propriedade de isometria. O integrando no segundo termo do lado

direito é limitado por

$$\begin{aligned}
 |\gamma(s)|^2 &= |\sin Q(s, P.) - \sin \hat{Q}(s, P.)|^2 + |\cos Q(s, P.) - \cos \hat{Q}(s, P.)|^2 \\
 &= 4 \sin^2 \left(\frac{Q(s, P.) - \hat{Q}(s, P.)}{2} \right) \leq \left| \int_0^s \frac{\mathcal{A}}{m} (P_r - \hat{P}_r) dr \right|^2 \\
 &\leq \left(\frac{\mathcal{A}}{m} \right)^2 s \int_0^s (P_r - \hat{P}_r)^2 dr \leq \left(\frac{\mathcal{A}}{m} \right)^2 T \int_0^s (P_r - \hat{P}_r)^2 dr,
 \end{aligned} \tag{3.2.22}$$

onde usamos a desigualdade de Cauchy-Shwarz na última linha.

Portanto, definindo $A(t) \equiv \mathbb{E} \left[|P_t - \hat{P}_t|^2 \right]$, obtemos

$$A(t) \leq 2A(0) + 2T \left(\frac{\mathcal{A}}{m} \right)^2 \int_0^t \int_0^s A(r) dr ds. \tag{3.2.23}$$

- Para melhorar a estimativa do limite superior de $A(t)$, modificamos o lema de Gronwall para lidar com a expressão (3.2.23):

Considere a desigualdade

$$u(t) \leq \alpha + \int_0^t ds \int_0^s v(r) u(r) dr, \tag{3.2.24}$$

onde $\alpha > 0$ e $v(r) \geq 0 \forall r \geq 0$. Defina

$$\omega(t) = \alpha + \int_0^t ds \int_0^s v(r) u(r) dr \tag{3.2.25}$$

logo

$$\omega'(t) = \int_0^t v(r) u(r) dr. \tag{3.2.26}$$

Portanto,

$$\omega''(t) = v(t) u(t) \leq v(t) \omega(t). \tag{3.2.27}$$

Estamos interessados no caso $v(t) = \text{constante} = \kappa$. Então, podemos achar um limite superior para a última desigualdade na forma

$$\omega(t) \leq a e^{\sqrt{\kappa}t} + b e^{-\sqrt{\kappa}t}, \tag{3.2.28}$$

onde a e b são constantes dependentes das condições de contorno. Fazendo

$$\omega(0) = \alpha \tag{3.2.29}$$

$$\omega'(0) = 0,$$

obtemos

$$u(t) \leq \frac{\alpha}{2} (e^{\sqrt{\kappa}t} + e^{-\sqrt{\kappa}t}) \leq \alpha e^{\sqrt{\kappa}t} \quad \square \quad (3.2.30)$$

Logo, aplicando este resultado à equação (3.2.23) leva a

$$A(t) \leq 2A(0)e^{\sqrt{2T}(\mathcal{A}/m)t}, \quad (3.2.31)$$

que nos dá uma taxa de crescimento menor do que a anterior, sendo $\sim T^{1/2}$.

Voltando à equação (3.2.17), o movimento da partícula define um mapa (\mathcal{T}) de modo que

$$(p, P) \mapsto p_0 + \int_0^t \sigma(s, P) dU_s. \quad (3.2.32)$$

Denotamos esse mapeamento por

$$[\mathcal{T}(P)](t) := p_0 + \int_0^t \sigma(s, P) dU_s \quad (3.2.33)$$

e consideramos o esquema de iteração de Picard

$$P_t^{(k+1)} = P_t^{(0)} + \int_0^t \sigma(s, P_t^{(k)}) dU_s, \quad k \in \mathbb{Z}, \quad (3.2.34)$$

onde tomamos $P_t^{(0)} = p_0$.

No “espaço das trajetórias”, definimos a distância entre soluções

$$\mathcal{E}_\alpha(P, P') = \sup_{t \in [0, \infty)} \mathcal{E}(P_t, P'_t) e^{-\alpha t}, \quad \mathcal{E}(P_t, P'_t) \equiv \left\{ \mathbb{E} \left[|P_t - P'_t|^2 \right] \right\}^{1/2}. \quad (3.2.35)$$

Para o que segue, adotamos a notação

$$\eta^2 = 2 \left(\frac{\mathcal{A}}{m} \right)^2. \quad (3.2.36)$$

Combinando o resultado (3.2.23) e a definição (3.2.35), obtemos diretamente

$$\mathcal{E}_{\alpha/2}(\mathcal{T}(P), \mathcal{T}(P')) \leq \frac{\eta\sqrt{T}}{\alpha} \mathcal{E}_{\alpha/2}(P, P'). \quad (3.2.37)$$

Escolhendo $\alpha > \eta\sqrt{T}$, o teorema do ponto fixo de Banach garante que o mapeamento iterativo pode ser uma contração, assegurando a convergência do esquema para $t \in [0, T]$. \square

De maneira semelhante, se calcularmos a *distância* entre uma solução aproximada e a

solução exata (P_t^∞) de acordo com o esquema de Picard, temos

$$\mathcal{E}_{\alpha/2}(P_t^{(\infty)}, P_t^{(k+1)}) \leq \frac{\eta\sqrt{T}}{\alpha} \mathcal{E}_{\alpha/2}(P_t^{(\infty)}, P_t^{(k)}), \quad (3.2.38)$$

mostrando, explicitamente, que as soluções aproximadas tendem cada vez mais à solução exata a cada iteração.

3.3 Convergência numérica

Podemos prosseguir na análise do sistema usando um método numérico simples. Utilizaremos um integrador simplético de segunda ordem (*leap-frog*) para evoluir as equações de movimento e usar o resultado para calcular os passos de Picard, definidos por (3.2.34), de maneira similar à [36].

O algoritmo para o integrador é dado por

$$\begin{aligned} t_{k+1/2} &= t_k + h/2 \\ q_{k+1/2} &= q_k + p_k h/2 \\ p_{k+1} &= p_k + F(q_{k+1/2}, t_{k+1/2})h \end{aligned} \quad (3.3.1)$$

$$q_{k+1} = q_{k+1/2} + p_{k+1} h/2 \quad (3.3.2)$$

para o par coordenada, momento (q, p) , o termo de força F , tempo t e passo de iteração h . Em nosso caso, a força F é o lado direito da equação (3.1.1).

Primeiramente, para testar nosso algoritmo, consideramos um pêndulo simples, com força dada por $F(q) = -\sin(q)$, e obtemos resultados para as posições e velocidades como funções do tempo dadas duas funções iniciais diferentes para o *passo zero* do esquema de Picard.

Inicializamos o esquema de Picard com duas funções *semente* diferentes

$$f_1(t) = t^2 + \pi \quad (3.3.3)$$

$$f_2(t) = t + \pi. \quad (3.3.4)$$

A figura (3.1) mostra a evolução do décimo quinto passo de Picard ($npic = 15$) da posição e da velocidade do pêndulo. Vemos uma boa concordância entre as evoluções para as diferentes funções *semente* para tempos até $t = 15$.

Para a força dada pelo lado direito da equação (3.1.1), com $A_{m,n}$ escolhida aleatoriamente de uma distribuição gaussiana e $\phi_{m,n}$ escolhida aleatoriamente de uma distribuição uniforme,

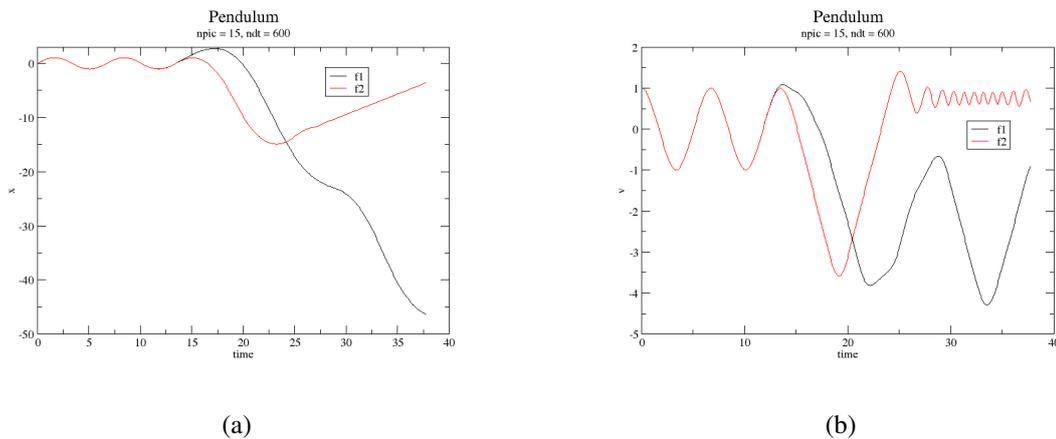


Figura 3.1: (a) Posição em função do tempo para o pêndulo; (b) Velocidade em função do tempo. Em ambos os gráficos, as condições iniciais $(q_0, p_0) = (0, 1)$. ndt indica o número de passos do integrador e $npic$ é o número de iterações de Picard.

repetimos o algoritmo leap-frog + Picard e obtemos curvas para a velocidade da partícula teste em função do tempo.

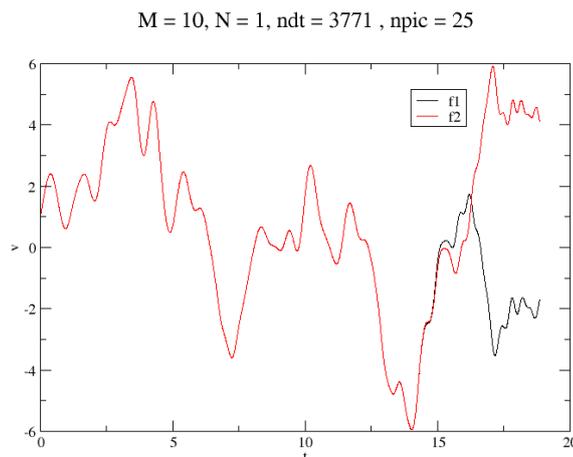


Figura 3.2: Velocidade em função do tempo para a solução de (3.2.34). O passo de tempo do integrador foi escolhido como sendo $h = 1/(20M)$ para assegurar que o sistema não varie bruscamente em um passo, dado que $\omega_{m,n} \leq M + 1$.

Como visto para o caso do pêndulo, as soluções obtidas de f_1 e f_2 são idênticas até um tempo $t \approx 15$. Se aumentarmos o passo de tempo para $h = 1/(2M)$, podemos simular um número maior de partículas no sistema com a mesma quantidade de passos do integrador sem ter que lidar com erros de segmentação da máquina usada para os cálculos. Os resultados são mostrados na figura (3.3). Novamente, a concordância entre soluções para diferentes funções *semente* se mantem para tempos até $t \approx 15$.

Podemos, também, testar a convergência de soluções calculando a distância (3.2.35) entre

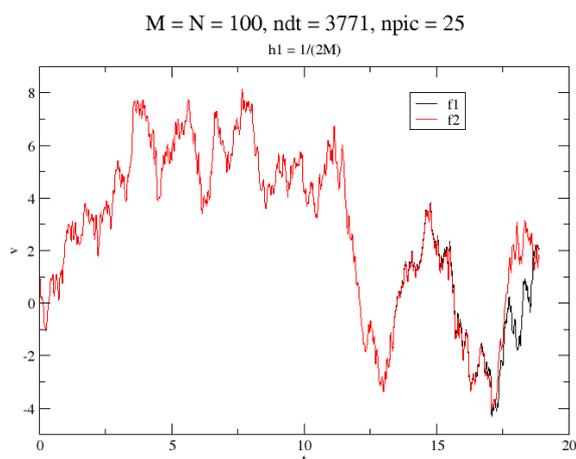


Figura 3.3: Velocidade em função do tempo para a solução de (3.2.34). O passo de tempo do integrador foi escolhido como sendo $h = 1/(2M)$.

as soluções de f_1 e f_2 . Os resultados são apresentados na figura (3.4).

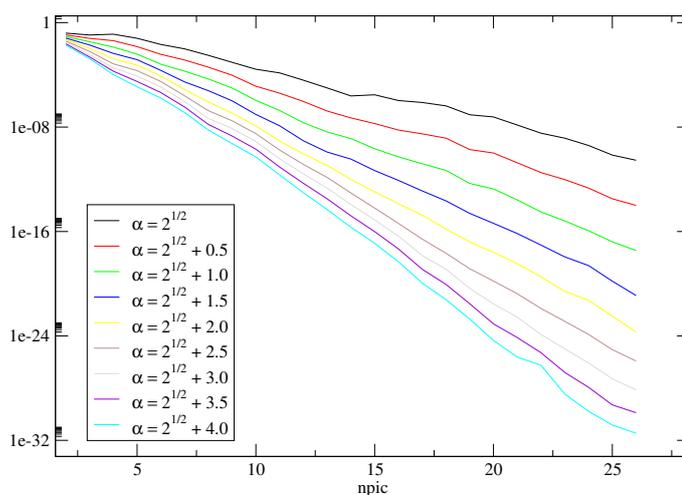


Figura 3.4: Evolução do quadrado da distância (3.2.37) entre iterações de f_1 e f_2 em escala logarítmica em função do número da iteração para vários valores de α . Para esta plotagem, $\eta = \sqrt{2}$ e $T = 6\pi$.

Para $\alpha = \sqrt{2}$, observamos um crescimento na distância em torno da iteração número 15. Do gráfico, vemos que para qualquer escolha de $\alpha > \sqrt{2}$, o mapa é uma contração. Entretanto, o resultado (3.2.37) nos mostra que a convergência do esquema iterativo estima $\alpha > \eta\sqrt{T} \approx 6.14$ para este caso. Isto não deve ser interpretado como uma contradição, pois fazemos estimativas “grosseiras” ao longo da demonstração de (3.2.37), uma vez que estamos apenas interessados em obter uma quantidade finita limitando o crescimento da distância entre soluções. Por construção, para valores maiores de α a distância vai mais rapidamente a zero.

4 *Dinâmica do modelo HMF*

O modelo onda-partícula, no caso de uma única onda, evolui de forma semelhante a um modelo simplificado de campo médio: o modelo Hamiltoniano de Campo Médio. Neste capítulo introduzimos este modelo de N partículas, focando em sua dinâmica. Este modelo é caracterizado pela natureza de seu potencial de interação entre partículas (potencial atrativo ou repulsivo). A partir de uma correção de ordem zero ao movimento das partículas, estudamos sua evolução individual no espaço das velocidades com interesse nas flutuações em torno da correção inicial. No caso de potencial repulsivo, os resultados analíticos são comprovados por experimentos numéricos de dinâmica molecular. Para o caso atrativo, apresentamos as principais hipóteses para a escolha da correção inicial e analisamos os resultados da simulação numérica.

4.1 *Introdução ao modelo HMF*

O modelo hamiltoniano de Campo Médio (*Hamiltonian Mean Field* - HMF) é um modelo simplificado de interação de longo alcance em que N partículas idênticas interagem com movimento restrito a um círculo unitário [10]. A dinâmica de cada partícula i do sistema é dada pela evolução temporal de sua posição angular $\theta_i \in]-\pi, \pi]$, e de seu momento conjugado p_i . As equações de movimento derivam da hamiltoniana

$$H_{\text{HMF}} = \sum_{i=0}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{K}{2N} \sum_{i,j} [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)], \quad (4.1.1)$$

onde a constante K define a natureza do potencial. O primeiro termo da hamiltoniana representa a soma das energias cinéticas de todas as partículas, enquanto o segundo, a energia potencial de interação entre elas. Neste sistema, cada partícula interage com todas as demais por meio de um campo de forças que é, a cada instante, a soma dos campos individuais produzidos por todas as partículas. Seguindo a prescrição de Kac [9, 10, 11], o potencial de interação, dado pelo segundo termo em (4.1.1), é reescalado pelo número de partículas garantindo a extensividade

da energia¹. O termo de interação na hamiltoniana equivale ao termo de interação do modelo XY de Heisenberg [12] na aproximação de campo médio². O modelo com interação positiva ($K > 0$) corresponde ao caso ferromagnético, enquanto o caso de interação negativa ($K < 0$) corresponde ao caso antiferromagnético.

A termodinâmica do modelo XY HMF é resolvida exatamente [9, 10, 26, 28], porém sua dinâmica fora do equilíbrio não pode ser determinada analiticamente. Podemos entender a complexidade da dinâmica escrevendo as equações de movimento

$$\begin{aligned}\dot{\theta}_i &= p_i \\ \dot{p}_i &= -\frac{K}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\theta_i - \theta_j),\end{aligned}\quad (4.1.2)$$

que correspondem a um sistema de N pêndulos totalmente acoplados. Introduzindo a quantidade

$$\mathbf{M} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e^{i\theta_i} \equiv M e^{i\varphi} \equiv (M_x, M_y), \quad (4.1.3)$$

podemos escrever a equação de movimento na forma

$$\dot{p}_i = -KM \sin(\theta_i - \varphi). \quad (4.1.4)$$

Portanto, o movimento de cada partícula é determinado por uma *interação* auto-consistente com um campo médio \mathbf{M} , que depende do tempo implicitamente, por meio da dependência instantânea com a posição de todas as partículas.

A energia média por partícula pode ser escrita na forma

$$U = \frac{H}{N} = \frac{\langle p^2 \rangle}{2} + \frac{K}{2}(1 - M^2), \quad (4.1.5)$$

onde $\langle \cdot \rangle$ representa uma média sobre as partículas. Partindo dessa expressão, podemos utilizar a quantidade de campo médio \mathbf{M} (comumente chamada de magnetização, pela analogia ao modelo de spins de Heisenberg [12]) como parâmetro de ordem para caracterizar as fases do sistema. No caso atrativo ($K = 1$), o estado fundamental corresponde ao estado em que todas as partículas se encontram na mesma posição (caso ferromagnético) levando a uma magnetização alta; no caso repulsivo ($K = -1$), o estado fundamental corresponde a uma distribuição uniforme de partículas no círculo, resultando em magnetização nula.

No limite $N \rightarrow \infty$, a evolução do sistema pode ser descrita por uma densidade de probabili-

¹Tornando o potencial termodinamicamente estável.

²Esta equivalência motiva o uso do nome Modelo hamiltoniano XY de Campo Médio (XY HMF) em alguns instantes desta tese.

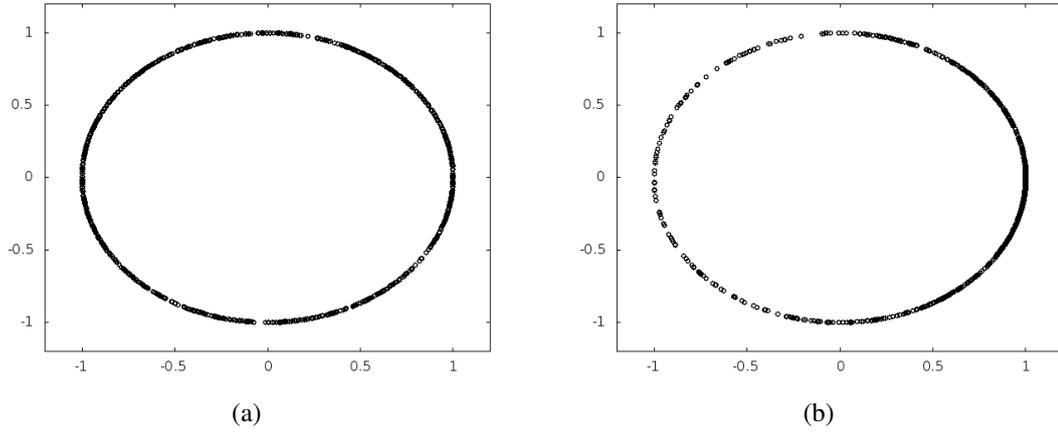


Figura 4.1: Representação da posição no espaço real das partículas do modelo XY HMF. (a) Estado de baixa energia do caso $K = -1$. (b) Estado de baixa energia do caso $K = 1$. Representação de $N = 1000$ partículas.

dade a uma partícula $f(p, \theta, t)$ definida no espaço (p, θ) (ver [15] e o Capítulo 2). Com esta, a magnetização é escrita na forma

$$\mathbf{M} = \int f(p, \theta) (\cos \theta, \sin \theta) dp d\theta, \quad (4.1.6)$$

onde a integral é avaliada em todo o espaço das posições e das velocidades. Para caracterizar a ordem do sistema, a entropia de Gibbs é definida pela expressão

$$S = - \sum_{i=1}^N \int f(p_i, \theta_i) \log f(p_i, \theta_i) dp_i d\theta_i. \quad (4.1.7)$$

O estado de equilíbrio, então, é encontrado por um método variacional de maximização da entropia (4.1.7) sujeita aos vínculos de energia total e de normalização da função f [9]³. O cálculo resulta em uma expressão auto-consistente para a magnetização no equilíbrio dada por

$$M = K \frac{I_1(\beta M)}{I_0(\beta M)}, \quad (4.1.8)$$

onde I_n representa a função de Bessel modificada de ordem n e β é o inverso da temperatura. Para o caso repulsivo ($K = -1$), a expressão (4.1.8) admite apenas $M = 0$ como solução, e o sistema sempre atinge o estado homogêneo no equilíbrio. Entretanto, no caso atrativo ($K = 1$), a expressão (4.1.8) admite solução $M \neq 0$, além da trivial $M = 0$, i.e., existe uma temperatura crítica $T_c = \beta_c^{-1} = \langle p^2 \rangle$, associada a uma energia crítica por partícula U_c através da relação (4.1.5), que separa um estado de equilíbrio homogêneo ($M = 0$) de um estado aglomerado ($0 < M < 1$).

Caso o sistema tenha uma energia $U > U_c$, as partículas têm energia cinética suficiente

³O cálculo detalhado pode ser dado por método semelhante ao apresentado no Capítulo 5 desta tese.

para visitar todo o círculo. Portanto, partindo de uma condição inicial uniforme, o sistema permanece no estado homogêneo caracterizado por uma magnetização oscilando em torno do zero. Para energias abaixo de U_c , observa-se a formação de aglomerados no espaço de fases, uma vez que uma parcela das partículas ficam presas em uma região de ressonância com o modo coletivo \mathbf{M} . Para melhor entender esse comportamento, analisamos a dinâmica dada pela equação (4.1.4), que coincide com a equação de movimento de um pêndulo (com amplitude instantânea determinada por M). Logo, sabendo que a energia de uma partícula é dada por

$$e_i = \frac{p_i^2}{2} + K[1 - M \cos(\theta_i - \varphi)], \quad (4.1.9)$$

vemos que a largura da separatriz do movimento pendular associado à equação (4.1.4) é dado por $2\sqrt{KM}$ e sua energia por $E_s = K(1 + M)$. Note que a separatriz, naturalmente, define dois tipos de trajetórias para as partículas:

- Se $e_i \leq E_s$, o momento p_i assume valor zero para dois valores de θ_i e seu módulo é confinado pela largura da separatriz, uma vez que

$$\begin{aligned} \frac{p_i^2}{2} + K[1 - M \cos(\theta_i - \varphi)] &\leq K(1 + M), \\ p_i^2 &\leq 2KM[1 - \cos(\theta_i - \varphi)], \\ p_i^2 &\leq 4KM, \\ |p_i| &\leq 2\sqrt{KM}. \end{aligned} \quad (4.1.10)$$

Logo, a trajetória no espaço de fases tem forma elíptica e é simétrica em torno de $p_i = 0$.

- Se $e_i > E_s$, p_i nunca é igual a zero e seu sinal é definido pelas condições iniciais.

Por suas características dinâmicas, podemos agrupar as partículas do sistema em dois grupos: as partículas de alta energia (PAE), que possuem $e_i > E_s$ e visitam todo o círculo; e as partículas de baixa energia (PBE), com $e_i < E_s$, confinadas ao movimento periódico do interior da separatriz.

No caso supercrítico, $U > U_c$, a largura da separatriz vai a zero (a distribuição das partículas no equilíbrio é uniforme no círculo, implicando em $M = 0$), portanto todas as partículas são PAE. No caso subcrítico, $U < U_c$, identificamos, numericamente, dois regimes distintos. Para energias baixas, um estado estacionário com um aglomerado de partículas é formado, sendo todas as partículas confinadas pela separatriz e com centro de massa fixo. Esse caso é ilustrado pela figura 4.2 e denominado de Caso Subcrítico Confinado (CSC).

Para energias próximas à energia crítica U_c , uma parcela das partículas tem energia sufici-

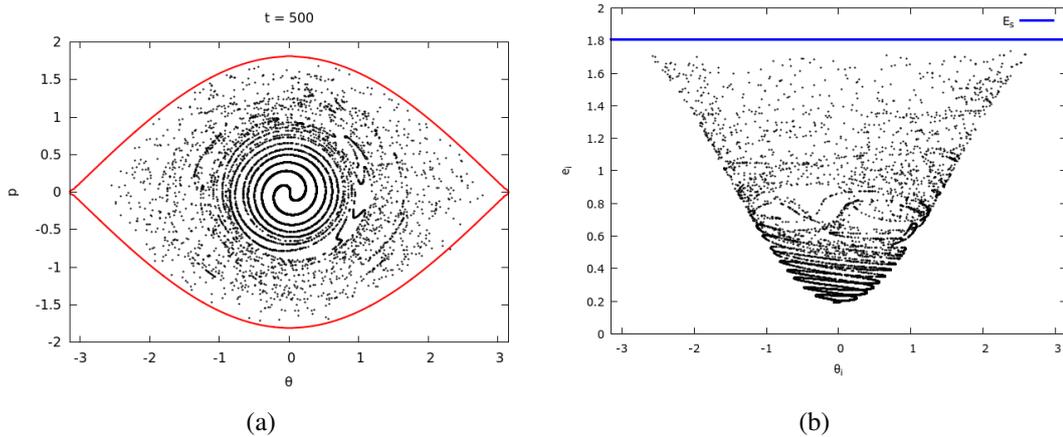


Figura 4.2: (a): Retrato de fases do sistema no estado de equilíbrio quasi-estacionário. A linha contínua representa a separatriz instantânea. (b): Energia individual de cada partícula em função de sua posição angular no anel. A linha contínua representa a energia da separatriz. Note que o movimento é dominado pela energia potencial definida pelo segundo termo da equação (4.1.9). As figuras são geradas por uma simulação de dinâmica molecular com $N = 10^4$ e $U \approx 0,3$.

ente para permanecer fora da separatriz. Um aglomerado é formado com centro de massa de energia cinética finita. A figura 4.3 ilustra este caso, chamado de Caso Subcrítico Translacional (CST).

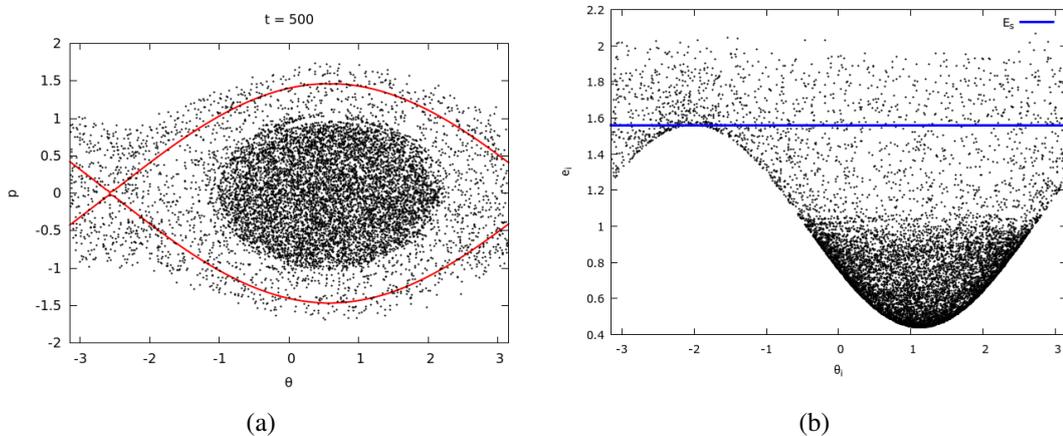


Figura 4.3: (a): Retrato de fases do sistema no estado de equilíbrio quasi-estacionário. A linha contínua representa a separatriz instantânea. (b): Energia individual de cada partícula em função de sua posição angular no anel. A linha contínua representa a energia da separatriz. Note que o movimento das PAE define um espectro de energia aproximadamente contínuo acima da linha $e_i = E_s$. As figuras são geradas por uma simulação de dinâmica molecular com $N = 10^4$ e $U \approx 0,5$.

Esta dependência com a energia inicial do modelo está intimamente associada à escolha da distribuição inicial das partículas. Partindo de uma condição inicial espacialmente homogênea (baixa magnetização), é possível observar que o sistema possui duas fases iniciais distintas: uma primeira *relaxação violenta* seguida de um *estado quase-estacionário*. A primeira fase

é marcada pelo movimento desordenado das partículas no círculo, com grandes variações na magnetização. Já o estado quase-estacionário constitui uma fase com tempo de vida muito longo (dependente de N) com alta magnetização e poucas flutuações em suas grandezas dinâmicas.

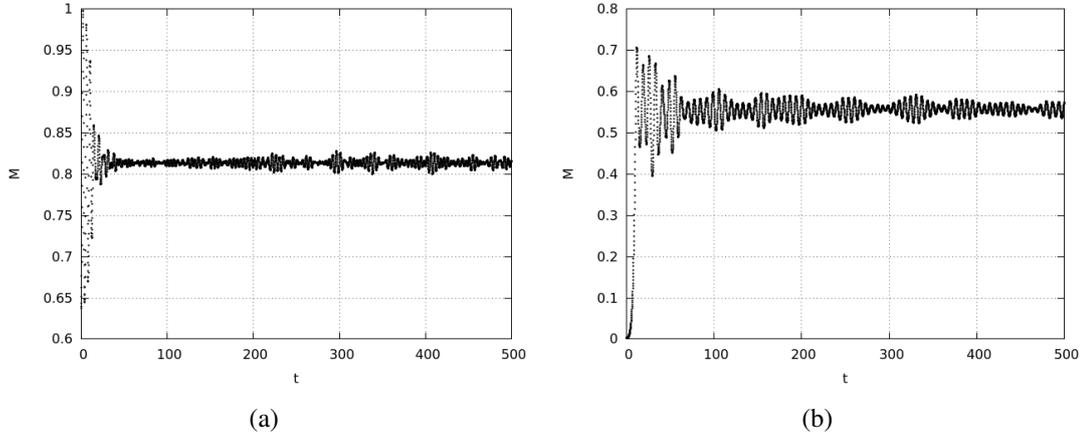


Figura 4.4: Evolução temporal do parâmetro de ordem M para o (a) CSC e para o (b) CST. Em ambas as figuras vemos a existência de uma relaxação violenta para tempos curtos, seguida de um estado de longa duração com magnetização alta e poucas flutuações. Simulação realizada com $N = 10^4$

4.1.1 Relação com o modelo onda-partícula

A hamiltoniana que descreve a evolução do sistema de interação onda-partícula é dada por

$$H_{ac} = \sum_{i=1}^{N_C} \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{r=1}^M \omega_{r0} I_r - \sum_{i=1}^{N_C} \sum_{r=1}^M c_r \sqrt{I_r} \cos(k_r x_i - \theta_r), \quad (4.1.11)$$

onde x_i, p_i são variáveis conjugadas de posição e momento associadas às N partículas e θ_r, I_r são variáveis de ângulo ação associadas às M ondas, de acordo com (1.4.10). O modelo de uma única onda gera as equações de movimento para as partículas

$$\dot{x}_i = p_i \quad (4.1.12)$$

$$\dot{p}_i = -c\sqrt{I} \sin(x_i - \theta), \quad (4.1.13)$$

conforme as expressões (1.4.11) e (1.4.12). Nestas últimas equações, omitimos o índice relacionado às ondas e escolhemos uma escala de comprimento compatível com a simplificação $k = 1$.

Note que, fazendo a associação $c\sqrt{I} \rightarrow KM$, as equações (4.1.12) e (4.1.13) são idênticas à evolução descrita por (4.1.4). O campo médio auto-consistente (\mathbf{M}) do modelo HMF tem o mesmo papel da onda auto-consistente de intensidade I . Entretanto, enquanto a evolução temporal do campo \mathbf{M} é implícita devido à dependência com as posições de todas as partículas

(ver (4.1.3)), uma onda no modelo de interação onda-partícula representa um grau de liberdade dinâmico, tendo sua própria equação de evolução.

4.2 Análise da dinâmica

Considere um sistema de N partículas evoluindo no espaço de fases $S_L^N \times \mathbb{R}^N$, em que as partículas interagem aos pares. O potencial de interação pode ser expandido em uma série de Fourier de modo que a evolução do sistema é dada pela hamiltoniana

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} - \frac{1}{2N} \sum_{n=1}^s \sum_{i,j=1}^N V_n \cos[k_n(q_j - q_i)], \quad (4.2.1)$$

onde a i -ésima partícula tem posição q_i e momento conjugado p_i , $S_L = \mathbb{R}/L$ e consideramos apenas os primeiros s componentes de longo alcance do potencial com número de onda $k_n = 2\pi n/L$.

Introduzimos a quantidade de campo médio

$$\mathbf{M}_n = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e^{ik_n q_i} \equiv M_n e^{i\varphi_n}, \quad (4.2.2)$$

com a qual escrevemos a equação de movimento

$$\ddot{q}_i = - \sum_{n=1}^s k_n V_n M_n \sin(k_n q_i - \varphi). \quad (4.2.3)$$

Trabalharemos um caso simples, em que $s = 1$ e $|V_n| = 1$. Podemos, também, escolher o tamanho do sistema sendo $L = 2\pi$ (estando, assim, trabalhando com o modelo hamiltoniano de Campo Médio - HMF [10]). Neste caso, o sinal de V_n determina se o potencial é repulsivo ($V_n < 0$) ou atrativo ($V_n > 0$). Para o caso atrativo, mostra-se que uma transição de fase ocorre para um certo valor do inverso da temperatura (β_c), acima do qual estruturas aglomeradas no espaço de fases são formadas no estado estável. Para o caso repulsivo, não existe transição de fase e o sistema permanece em um estado homogêneo.

4.3 Caso repulsivo ($V_1 < 0$)

Como não há formação de estruturas aglomeradas no estado estável, como primeira aproximação ao movimento das partículas tomaremos o movimento balístico dado por

$$q_j(t) = q_{j0} + v_{j0}t + Q_j, \quad (4.3.1)$$

onde q_{j0} é a posição inicial da partícula j com velocidade inicial v_{j0} e Q_j é uma correção pequena ao movimento balístico ($Q_j \ll q_j$), que será desprezada, por enquanto.

Logo, escrevemos

$$Me^{i\varphi} \simeq M^{(0)} e^{i\varphi^{(0)}} := \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{i(q_{j0} + v_{j0}t)} \quad (4.3.2)$$

e

$$\ddot{q}_j \simeq M^{(0)} \sin(q_j - \varphi^{(0)}). \quad (4.3.3)$$

O objetivo desta seção é escrever a equação de evolução (4.3.3) como uma equação diferencial sujeita a um processo conhecido (possivelmente estocástico). Para este fim, assumimos que é possível escrever o número de partículas como o produto de dois números inteiros $N = N' \cdot N''$ e reescalamos o tempo para $t' = t/N''$, obtendo

$$M^{(0)} e^{i\varphi^{(0)}} dt = \frac{1}{N'^{1/2}} \sqrt{2\pi} dW_{t'}^N, \quad (4.3.4)$$

onde introduzimos o processo de valor complexo

$$dW_{t'}^N = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} N'^{-1/2} \sum_{j=1}^N e^{iq_{j0}} e^{iN'' v_{j0} t'} dt'. \quad (4.3.5)$$

Com esta definição, escrevemos a equação de movimento na forma

$$dq_i = N'' p_i dt' \quad (4.3.6)$$

$$dp_i = \frac{\sqrt{2\pi}}{N'^{1/2}} [\sin(q_i) d\Re(W_{t'}^N) - \cos(q_i) d\Im(W_{t'}^N)]. \quad (4.3.7)$$

Reescalamos o momento para $p'_i = N'' p_i$ e assumimos, ainda, que podemos escrever $N'' = N'^{1/2} = N^{1/3}$ para obter

$$dq_i = p'_i dt' \quad (4.3.8)$$

$$dp'_i = \sqrt{2\pi} [\sin(q_i) d\Re(W_{t'}^N) - \cos(q_i) d\Im(W_{t'}^N)]. \quad (4.3.9)$$

De maneira consistente, fazemos

$$v'_{j0} = N'' v_{j0}, \quad (4.3.10)$$

para ter

$$dW_{t'}^N \equiv dW_{N''}^{N'}(t') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} N'^{-1/2} \sum_{j=1}^{N'N''} e^{iq_{j0}} e^{iv'_{j0} t'} dt'. \quad (4.3.11)$$

Inicialmente, as partículas são distribuídas uniformemente no espaço das posições. No espaço das velocidades, escolhemos uma distribuição inicial de feixes igualmente espaçados contendo uma partícula cada. No limite de $N \rightarrow \infty$, a distribuição das partículas converge para uma distribuição de “waterbag” [34]⁴, ver figura 4.5.

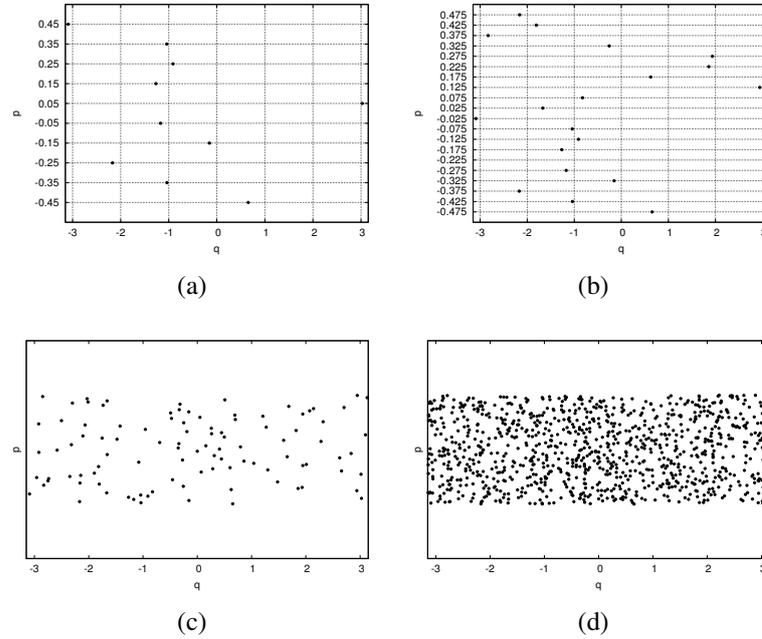


Figura 4.5: Distribuição inicial das partículas em feixes monocinéticos no espaço (q, p) . Distribuição de (a): 10 partículas, (b) 20 partículas, (c) 100 partículas e (d) 1000 partículas. Podemos ver como a distribuição se aproxima de uma “waterbag”.

Para modelar nosso modelo de “feixes”, escolhemos

$$v'_{j0} = \frac{j}{N''} - \frac{N'}{2} \quad (4.3.12)$$

e decidimos trabalhar com matrizes $N' \times N''$ dadas por $q_{m,n}^0$ e $v'_{m,n}{}^0$ ao invés dos vetores N -dimensionais q_{j0} e v'_{j0} . Neste quadro, a nova representação para as velocidades iniciais é dada por

$$v'_{m,n}{}^0 = (m-1) + \frac{n}{N''} - \frac{N'}{2}, \quad (4.3.13)$$

onde $m = 1, \dots, N''$ e $n = 1, \dots, N'$, enquanto as posições iniciais são, simplesmente, q_{mn}^0 e permanecem distribuídas de maneira uniforme. Com essa nova formulação, o processo (4.3.11)

⁴A distribuição de “waterbag” equivale a uma distribuição em que posições são distribuídas uniformemente em uma região $[-q_0, q_0]$ do espaço e os momentos, de maneira equivalente, são distribuídos em uma região $[-p_0, p_0]$ do espaço dos momentos. Essa distribuição é representada por uma função de distribuição a uma partícula dada por

$$f_{\text{WB}} = \frac{1}{4q_0p_0} \Theta(q_0 - |q|) \Theta(p_0 - |p|),$$

onde Θ é a função degrau de Heaviside.

assume a forma

$$dW_{N''}^{N'}(t') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} N'^{-1/2} \sum_{n=1}^{N'} \sum_{m=1}^{N''} e^{iq_{mn}^0} e^{i[(m-1)+n/N''-N'/2]t'} dt'. \quad (4.3.14)$$

4.3.1 Limite $N \rightarrow \infty$

Nota-se que o termo $e^{iq_{mn}^0}$, definido acima, satisfaz a condição (S4). Portanto, de acordo com [20], no limite $N', N'' \rightarrow \infty$, o processo $W_{N''}^{N'}(t')$ converge para um processo de Wiener unidimensional ($W_{t'}$) em \mathbb{C} . Logo, considere a equação de movimento reescrita

$$dq_i = p'_i dt' \quad (4.3.15)$$

$$dp'_i = \sqrt{2\pi} [\sin(q_i) d\Re(W_{t'}) - \cos(q_i) d\Im(W_{t'})]. \quad (4.3.16)$$

Usando a proposição 4.2 de [20], no limite $N', N'' \rightarrow \infty$, o processo (q_i, p'_i) converge, em lei, para

$$\begin{aligned} q_i(t') &= q_{i0} + p'_{i0} t' + \int_0^{t'} B_i(s) ds \\ p'_i(t') &= p'_{i0} + B_i(t'), \end{aligned} \quad (4.3.17)$$

onde B_i é uma realização do movimento Browniano padrão em uma dimensão.

Calculando as variações de (4.3.17),

$$\begin{aligned} \delta q_i(t') &\sim t' \delta p'_i \sim t'^{3/2} \\ \delta p'_i(t') &\sim B(t') \sim t'^{1/2}. \end{aligned} \quad (4.3.18)$$

Logo, como correção ao movimento balístico, obtemos

$$q_j(t) = q_{j0} + v_{j0} t + \delta q_i(t') \sim q_{j0} + v_{j0} t + \left(\frac{t}{N''}\right)^{3/2}. \quad (4.3.19)$$

A aproximação balística é válida, então, para tempos

$$\frac{t}{N''} \ll 1, \quad (4.3.20)$$

condição garantida para tempos finitos no limite $N', N'' \rightarrow \infty$. Para N finito, a abordagem falha quando $t \sim N'' \sim N^{1/3}$. Além disso, qualquer número fixo de partículas é independente no limite.

4.4 Caso repulsivo - Abordagem de Picard

Para obter uma estimativa mais precisa para a validade de nossa abordagem, voltemos à expressão (4.3.1) para não desprezar o termo pequeno de correção (Q_j). Fazendo isto, devemos corrigir M para

$$\begin{aligned} M dt &= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{i(q_{j0} + v_{j0}t)} e^{iQ_j(t)} dt \\ &= dC_t + idS_t, \end{aligned} \quad (4.4.1)$$

dados

$$\begin{aligned} dC_t &= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \cos(w_{j0}(t) + Q_j(t)) dt \\ dS_t &= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sin(w_{j0}(t) + Q_j(t)) dt, \end{aligned} \quad (4.4.2)$$

onde

$$w_{j0}(t) = q_{j0} + v_{j0}t. \quad (4.4.3)$$

Como estamos assumindo pequenos desvios do movimento balístico, usamos as expressões aproximadas

$$\begin{aligned} dC_t &\simeq \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N [\cos w_{j0}(t) - Q_j(t) \sin w_{j0}(t)] dt \\ dS_t &\simeq \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N [\sin w_{j0}(t) + Q_j(t) \cos w_{j0}(t)] dt. \end{aligned} \quad (4.4.4)$$

Definimos as novas variáveis de interesse ($Q_j(t), P_j(t)$) como

$$\begin{aligned} q_j(t) &= q_{j0} + v_{j0}t + Q_j(t) \\ p_j(t) &= v_{j0} + P_j(t), \end{aligned} \quad (4.4.5)$$

obedecendo a equação de movimento

$$\begin{aligned} dP_i &= \sin(w_{i0} + Q_i) d\tilde{C}_t - \cos(w_{i0} + Q_i) d\tilde{S}_t \\ &\quad - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N Q_j [\cos(w_{i0} + Q_i) \cos w_{j0} + \sin(w_{i0} + Q_i) \sin w_{j0}] dt, \end{aligned} \quad (4.4.6)$$

com

$$\begin{aligned} d\tilde{C}_t &= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \cos w_{j0}(t) dt = \frac{1}{N'} \sum_{j=1}^N \cos w_{j0}(t) dt' \\ d\tilde{S}_t &= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sin w_{j0}(t) dt = \frac{1}{N'} \sum_{j=1}^N \sin w_{j0}(t) dt'. \end{aligned} \quad (4.4.7)$$

Dessas definições, pode-se observar que

$$\frac{\sqrt{2\pi}}{N'^{1/2}} dW_{N''}^{N'}(t') = d\tilde{C}_t + id\tilde{S}_t. \quad (4.4.8)$$

Como feito na seção anterior, definimos $P'_i = N''P_i$ para obter

$$\begin{aligned} dP'_i &= \sqrt{2\pi} [\sin(w_{i0} + Q_i) d\Re W_{N''}^{N'}(t') - \cos(w_{i0} + Q_i) d\Im W_{N''}^{N'}(t')] \\ &\quad - \frac{1}{N'^{1/2}} \sum_{j=1}^N Q_j [\cos(w_{i0} + Q_i) \cos w_{j0} + \sin(w_{i0} + Q_i) \sin w_{j0}] dt' \end{aligned} \quad (4.4.9)$$

e

$$dQ_i = P'_i dt', \quad \text{por construção.} \quad (4.4.10)$$

Para estimar a dinâmica do sistema, considerando uma perturbação no movimento balístico, podemos usar uma abordagem iterativa ao problema. Para tal, usamos o método de Picard [45] para escrever a evolução

$$\begin{aligned} Q_{it'}^{(m)} &= Q_{i0} + \int_0^{t'} P_{is}^{(m)} ds \quad (4.4.11) \\ P_{it'}^{(m+1)} &= P_{i0} + \sqrt{2\pi} \int_0^{t'} [\sin(w_{i0} + Q_{is}^{(m)}) d\Re W_{N''}^{N'}(s) \\ &\quad - \cos(w_{i0} + Q_{is}^{(m)}) d\Im W_{N''}^{N'}(s)] \\ &\quad - \frac{1}{N'^{1/2}} \int_0^{t'} \sum_{j=1}^N Q_{js}^{(m)} [\cos(w_{i0} + Q_{is}^{(m)}) \cos w_{j0} \\ &\quad + \sin(w_{i0} + Q_{is}^{(m)}) \sin w_{j0}] ds, \end{aligned} \quad (4.4.12)$$

que converge à solução exata quando $m \rightarrow \infty$. A *semente* $(Q_i^{(0)}, P_i^{(0)})$ para este esquema será o próprio movimento balístico, de modo que correções resultam de maiores valores de m .

De acordo com (4.4.5), a *semente balística* corresponde a

$$(Q_{i0}, P_{i0}) = (0, 0). \quad (4.4.13)$$

Logo, a primeira correção é dada por

$$P'_{it'}(1) = \sqrt{2\pi} \int_0^{t'} [\sin w_{i0} d\Re W_{N'}^{N''}(s) - \cos w_{i0} d\Im W_{N'}^{N''}(s)], \quad (4.4.14)$$

que, no limite de $N', N'' \rightarrow \infty$, nos dá, exatamente, a equação (4.3.16). Portanto, $P'_{it'}(1)$ converge, em lei, ao movimento Browniano unidimensional. Assim,

$$\lim_{N', N'' \rightarrow \infty} P'_{it'}(1) = B_i(t') \quad (4.4.15)$$

$$\lim_{N', N'' \rightarrow \infty} Q'_{it'}(1) = \int_0^{t'} B_i(s) ds. \quad (4.4.16)$$

Calculando a segunda correção, temos

$$\begin{aligned} P'_{it'}(2) &= \sqrt{2\pi} \int_0^{t'} [\sin(w_{i0} + Q_{is}^{(1)}) d\Re W_{N'}^{N''}(s) \\ &\quad - \cos(w_{i0} + Q_{is}^{(1)}) d\Im W_{N'}^{N''}(s)] \\ &\quad - \frac{1}{N^{1/2}} \int_0^{t'} \sum_{j=1}^N Q_{js}^{(1)} [\cos(w_{i0} + Q_{is}^{(1)}) \cos w_{j0} \\ &\quad + \sin(w_{i0} + Q_{is}^{(1)}) \sin w_{j0}] ds. \end{aligned} \quad (4.4.17)$$

O primeiro termo no lado direito da equação ainda converge a um movimento Browniano no limite $N', N'' \rightarrow \infty$. Para estimar a contribuição da segunda integral, calculamos a expectativa do quadrado de (4.4.17),

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[|P'_{it'}(2)|^2] &\leq 4\pi^2 \mathbb{E} \left[\left(\int_0^{t'} [\sin(w_{i0} + Q_{is}^{(1)}) d\Re W_{N'}^{N''}(s) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \cos(w_{i0} + Q_{is}^{(1)}) d\Im W_{N'}^{N''}(s)] \right)^2 \right] \\ &\quad + \frac{2}{N} \mathbb{E} \left[\left(\int_0^{t'} \sum_{j=1}^N Q_{js}^{(1)} [\cos(w_{i0} + Q_{is}^{(1)}) \cos w_{j0} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \sin(w_{i0} + Q_{is}^{(1)}) \sin w_{j0}] ds \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (4.4.18)$$

A primeira integral contribui com um termo crescendo com t' no limite $N', N'' \rightarrow \infty$, caracterizando a origem Browniana do termo. O segundo termo tem um limite superior dado por

$$\frac{2}{N'} \mathbb{E} \left[\left(\sum_{j=1}^N 2 \int_0^{t'} Q_{js}^{(1)} ds \right)^2 \right] \sim \frac{8}{N'} N^2 t'^5 = \frac{8}{N'} N^2 \frac{t}{N'^5} = 8 \frac{t^5}{N''}. \quad (4.4.19)$$

Portanto, a contribuição da segunda integral em (4.4.18) é desprezível no limite de $N', N'' \rightarrow$

∞ , para tempos finitos. Mais precisamente, podemos desprezar esse termo quando

$$N'' \gg t^5. \quad (4.4.20)$$

Logo, no limite $N', N'' \rightarrow \infty$, a segunda correção é, novamente, um ruído Browniano. Assim, o esquema de Picard atinge uma solução estacionária em sua primeira iteração.

Para o caso repulsivo, mostramos que a magnetização M converge a um processo de Wiener unidimensional gerando uma correção de caráter Browniano ao movimento balístico inicial das partículas, a partir de uma configuração inicial de “feixes uniformes de velocidade”, ilustrada pela figura 4.5. Este resultado é válido para um número infinito de partículas e tempos finitos.

4.4.1 Comprovação numérica

Para comprovar nosso resultado teórico, podemos simular a evolução do sistema dada pela hamiltoniana (4.2.1) e observar as flutuações nas velocidades das partículas. A simulação é feita por dinâmica molecular e a evolução temporal do sistema é calculada pelo integrador simplético de quarta ordem de Yoshida [48]. Os códigos foram desenvolvidos na linguagem C. Como estamos tomando todas as massas unitárias, não faremos distinção, nesta seção, entre velocidade e momento das partículas.

Para manter o sistema com momento inicial total igual a zero, deslocamos a condição (4.3.12) para

$$v'_{j0} = \frac{j + 1/2}{N^{1/3}} - \frac{N^{2/3}}{2}, \quad (4.4.21)$$

onde usamos $N'' = \sqrt{N'} = N^{1/3}$. O retrato de fases para esta configuração inicial (em $t = 0$) das velocidades, com uma distribuição uniforme das posições no intervalo $[0, 2\pi]$ é apresentada, juntamente a um retrato de fase para um tempo posterior ($t = 200$), na figura 4.6.

Como primeira ilustração do movimento das partículas no espaço das velocidades, simulamos o sistema com 10^4 partículas, escolhemos arbitrariamente 6 partículas e plotamos a evolução de cada um dos respectivos $P_j(t)$'s com um passo de tempo do integrador de $dt = 0.1$. O resultado é mostrado na figura 4.7.

Para testar o caráter da distribuição das oscilações nas velocidades, primeiramente tratamos os P_j como processos estocásticos compostos por um número de variáveis aleatórias igual ao número de passos de tempo. Sabemos, também, que um processo de Wiener $W(t)$ (descrição matemática do movimento Browniano) é um processo Gaussiano com incrementos independen-

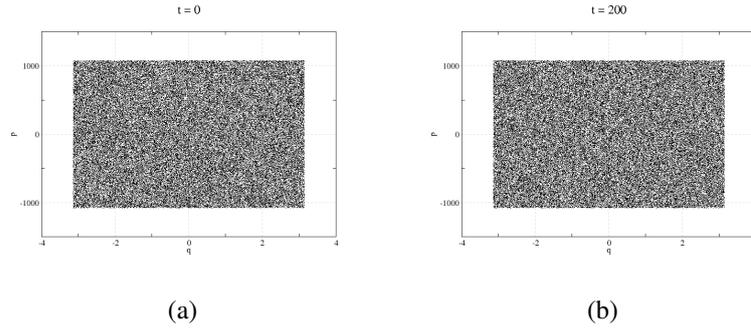


Figura 4.6: Retratos de fase: (a) representa o estado inicial do sistema e (b) o estado em um tempo de simulação $t = 200$. Nota-se que não há transição de fase neste sistema, i.e., o sistema permanece em um estado homogêneo. Os gráficos são feitos com 10^5 partículas.

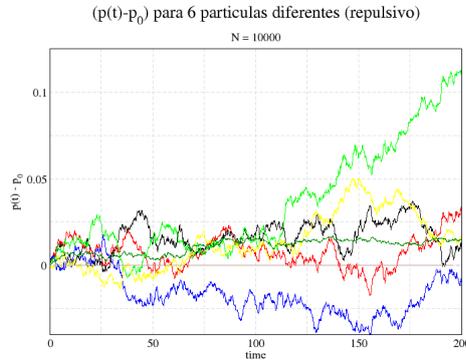


Figura 4.7: Trajetórias de 6 diferentes partículas no espaço das velocidades. O número de partículas simuladas é igual a 10^4 e as condições iniciais são dadas por (4.4.21).

tes caracterizado por

$$W(0) = 0, \quad \mathbb{E}(W(t)) = 0, \quad \text{Var}(W(t) - W(0)) = t, \quad (4.4.22)$$

onde \mathbb{E} é o operador expectativa e Var a variância. Portanto, para testar se nosso processo P_j é um movimento Browniano, definimos o operador $\langle \bullet \rangle$ por sua ação sobre o processo R_j na forma

$$\langle R_j \rangle = \frac{1}{N} \sum_j R_j, \quad (4.4.23)$$

onde N é o número da amostragem. Com este, introduzimos a quantidade

$$S(t) = \sqrt{\left(\langle P_j^2(t) \rangle \right)}, \quad (4.4.24)$$

e verificamos se $S^2(t)$ cresce linearmente com t , de acordo com (4.4.22). Fazemos este teste simulando 10^6 partículas e escolhendo, dentre estas, 10^5 para a amostragem em (4.4.23). O resultado é apresentado na figura 4.8.

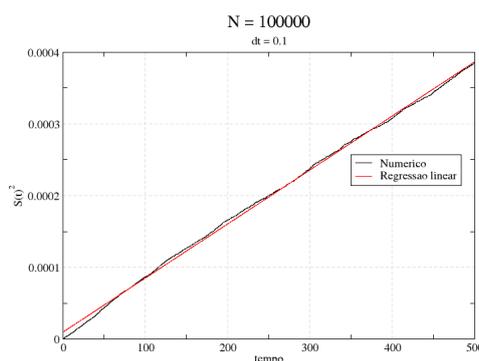


Figura 4.8: Evolução de $S^2(t)$ para um sistema de $n = 10^6$ partículas. Usamos uma amostragem de 10^5 partículas, um tempo total de simulação igual a 500 com um passo de tempo $dt = 0.1$.

Podemos, ainda, calcular os momentos de P_j para caracterizar sua distribuição. O k -ésimo momento de uma variável aleatória X é dado pela expectativa (operador \mathbb{E}) de $(X - \mu)^k$, onde μ é o valor médio de X [43]. Se X é um movimento Browniano, com distribuição Gaussiana, valor médio μ e variância σ^2 , mostra-se que [37, 43]

$$\mathbb{E}(X - \mu)^k = 0, \quad \text{para } k \text{ ímpar} \quad (4.4.25)$$

$$\mathbb{E}(X - \mu)^k = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (k-1), \quad \text{para } k \text{ par.} \quad (4.4.26)$$

Logo, devemos verificar, se P_j for de fato um ruído Browniano,

$$\frac{\langle P_j^k(t) \rangle}{S^k(t)} = 0, \quad \text{para } k \text{ ímpar} \quad (4.4.27)$$

$$\frac{\langle P_j^k(t) \rangle}{S^k(t) \cdot 1 \cdot 3 \cdots (k-1)} = 1, \quad \text{para } k \text{ par.} \quad (4.4.28)$$

Fazemos o teste com a mesma configuração usada para gerar a figura 4.8 e plotamos os resultados na figura 4.9.

Vemos, então, pelos resultados das figuras 4.8 e 4.9, que a simulação numérica está em boa concordância com os resultados analíticos da seção anterior. A forte flutuação em torno dos valores esperados na figura 4.9 está associada ao número finito de partículas usadas na simulação.

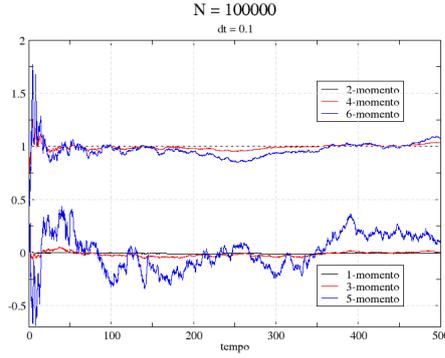


Figura 4.9: Momentos de $P_j(t)$. Usamos uma amostragem de 10^5 partículas, um tempo total de simulação igual a 500 com um passo de tempo $dt = 0.1$.

4.5 Caso atrativo ($V_1 > 0$)

No caso atrativo, devemos considerar a formação de aglomerados no espaço de fases. Para tal, consideramos, como uma aproximação grosseira, dois conjuntos de partículas no sistema: N_p **partículas passing** que se movem de acordo com um movimento balístico com correções devidas à presença de N_c **partículas do aglomerado** que permanecem dentro do “*olho do gato*”, e permanecem fixas. A figura 4.10 ilustra a dinâmica do espaço de fases para este sistema.

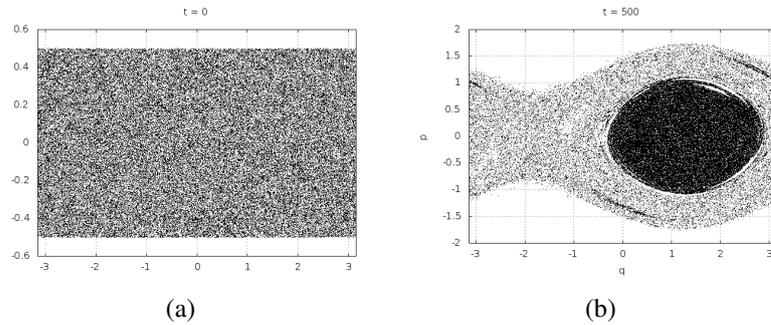


Figura 4.10: Retratos de fase: (a) representa o estado inicial do sistema e (b) o estado em um tempo de simulação $t = 500$. Nota-se a formação de uma estrutura aglomerada no espaço de fases. Os gráficos são feitos com 10^5 partículas.

Logo, podemos escrever

$$M = \frac{1}{N} \left(\sum_{j=1}^{N_p} e^{iq_j} + \underbrace{\sum_{j=1}^{N_c} e^{iq_j}}_{\text{constante}} \right), \quad N = N_p + N_c. \quad (4.5.1)$$

Assumimos que as partículas do aglomerado são estáticas⁵, logo, focamos na dinâmica das partículas *passing*. Como feito para o caso repulsivo, escrevemos a posição dessas partículas como

$$q_j(t) = w_{j0}(t) + Q_j(t), \quad (4.5.2)$$

onde $Q_j(t)$ não pode ser considerado pequeno.

Para este caso, temos a magnetização

$$Mdt = dC_t + dS_t, \quad (4.5.3)$$

$$dC_t = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \cos(w_{j0} + Q_j) dt \quad (4.5.4)$$

$$dS_t = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sin(w_{j0} + Q_j) dt. \quad (4.5.5)$$

No presente caso, a aproximação balística seria uma tentativa muito grosseira para o movimento das partículas. Logo, a abordagem analítica da seção anterior se torna difícil de aplicar. Podemos, entretanto, utilizar de métodos numéricos para analisar a dinâmica das partículas no espaço das velocidades. Usamos, novamente, dinâmica molecular para estudar o sistema. De acordo com a aproximação (4.5.1), precisamos distinguir as partículas do aglomerado das demais. Para tal, usamos um método simples: deixamos o sistema evoluir até atingir o estado quase-estacionário (até o aglomerado estar formado), contamos o número n_d de partículas na vizinhança de cada partícula e definimos um valor de corte n_{cut} determinando as partículas do aglomerado pela regra $n_d > n_{cut}$ (Ver figura 4.11(a)).

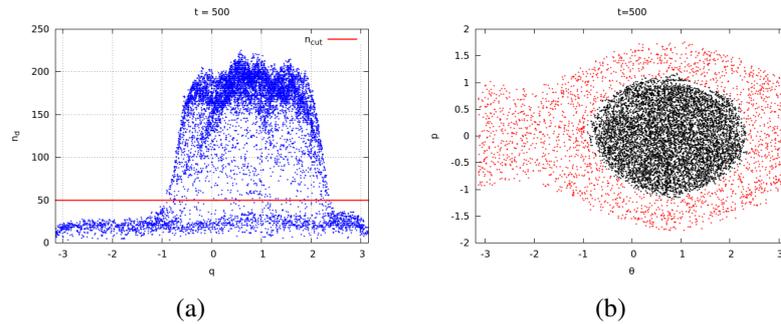


Figura 4.11: (a): Densidade n_d em função das posições das respectivas partículas. (b): Retrato de fases do sistema distinguindo as partículas do aglomerado (em preto) das demais (em vermelho). Gráficos elaborados para um sistema de $N = 10^4$ partículas.

Das simulações numéricas, observamos que a evolução da variância empírica $S^2(t)$ levando em conta **todas** as partículas do sistema (aglomerado e *passing*), definida pela relação (4.4.24),

⁵Poderíamos considerar as partículas no aglomerado se movendo, de maneira que sua distribuição permaneça inalterada, mas isto não é usual de se resolver exatamente, veja e.g. [49].

diverge rapidamente do comportamento linear esperado para ruídos Brownianos (veja a figura 4.12(b)), caracterizando um regime subdifusivo no espaço das velocidades.

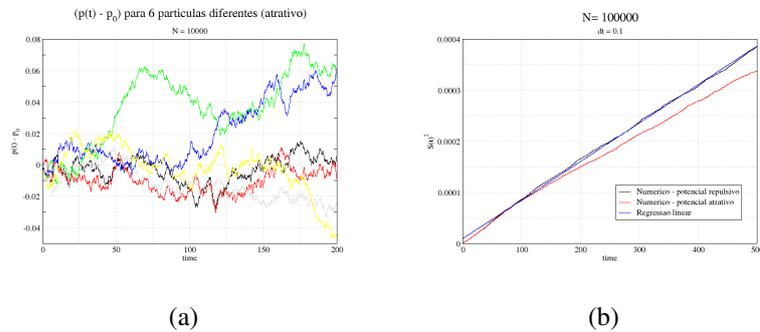


Figura 4.12: (a): Trajetórias de 6 diferentes partículas no espaço das velocidades. O número de partículas simuladas é igual a 10^4 e as condições iniciais são dadas por (4.4.21). (b): Evolução da variância empírica $S^2(t)$ para um sistema de $N = 10^6$ partículas. Usamos uma amostragem de 10^5 partículas, tempo de simulação $t = 500$ com um passo de tempo $dt = 0.1$.

Se restringirmos o cálculo da variância apenas às partículas fora do aglomerado, não observamos evidências de difusão, como mostrado na figura 4.13.

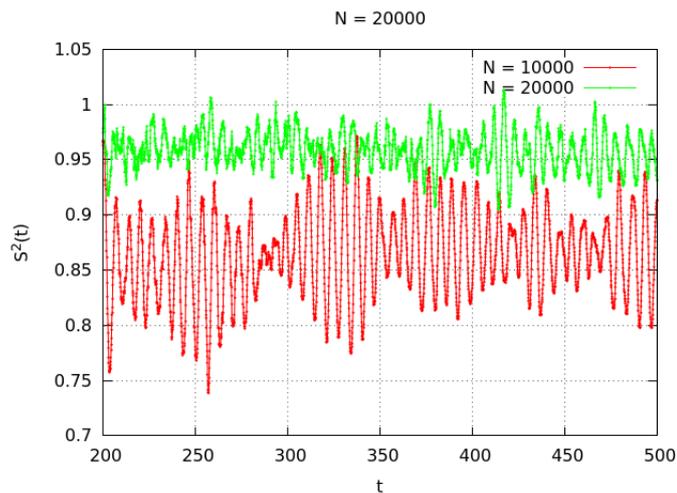


Figura 4.13: Evolução da variância empírica das partículas fora do aglomerado. O gráfico mostra a evolução para dois tamanhos diferentes do sistema.

A dificuldade em observar um regime difusivo, neste caso, está no fato de que as partículas não possuem, como no caso repulsivo, um único tipo de movimento. No caso repulsivo, todas as partículas tinham, em primeira aproximação, movimento balístico. Neste caso, vemos claramente dois tipos de movimento: o movimento “pendular” das partículas do aglomerado e o movimento das partículas *passing*. Essa variação grande no tipo de movimento gera incerteza na interpretação do resultado subdifusivo da figura 4.12(b).

Além disso, um olhar mais cauteloso mostra que as partículas *passing* apresentam, também,

dois tipos de movimento: aquele das partículas dentro da separatriz instantânea e aquele das partículas fora desta, onde a separatriz instantânea é calculada a partir da magnetização do sistema conforme método descrito na Seção 4.1.

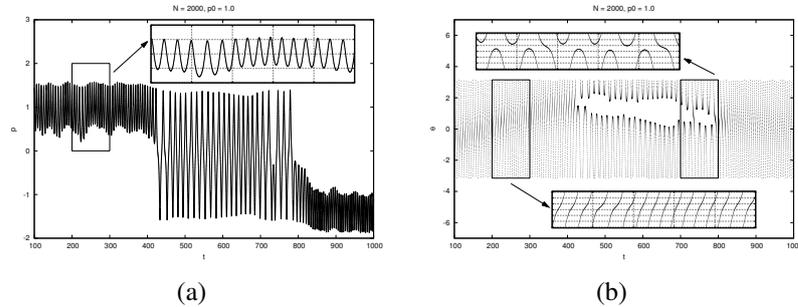


Figura 4.14: Evolução temporal (a) da velocidade e da posição (b) de uma típica partícula próxima à separatriz. Notamos que, antes da inversão (travessia da separatriz caracterizada pela mudança no sinal da velocidade), o movimento da partícula pode ser aproximado pelo movimento balístico.

Na figura 4.14, vemos como o movimento de uma partícula *passing* varia conforme sua posição em relação à separatriz. Dessa figura, podemos afirmar que o movimento das partículas de alta energia (PAE) longe da separatriz pode ser aproximado por um movimento balístico na mesma metodologia da seção anterior. Assim, podemos esperar um processo difusivo para estas partículas.

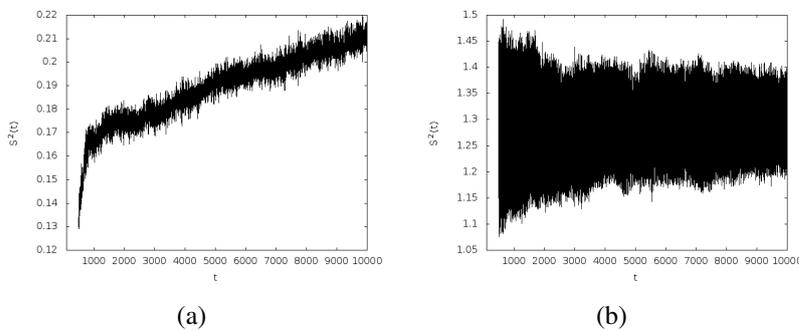


Figura 4.15: Evolução temporal da variância empírica das PAE para um sistema de $N = 10^5$. Sistema com condição inicial do tipo *waterbag* com (a) $p_0 = 0$ e (b) $p_0 = 1.0$.

A figura 4.15 mostra como a variância $S^2(t)$ evolue para diferentes condições iniciais do sistema. Se partimos de uma condição inicial de baixa energia (figura 4.15(a)), vemos um crescimento linear caracterizando a difusão normal após um regime de transição de curto período. Já para uma condição de energia mais alta, este período de transição é muito maior, conforme apontado pela figura 4.16.

É importante ressaltar que, para o cálculo da variância das PAE, usamos uma amostragem de 10^4 partículas. Essa escolha foi baseada na própria evolução do número de PAE, mostrada na figura 4.17.

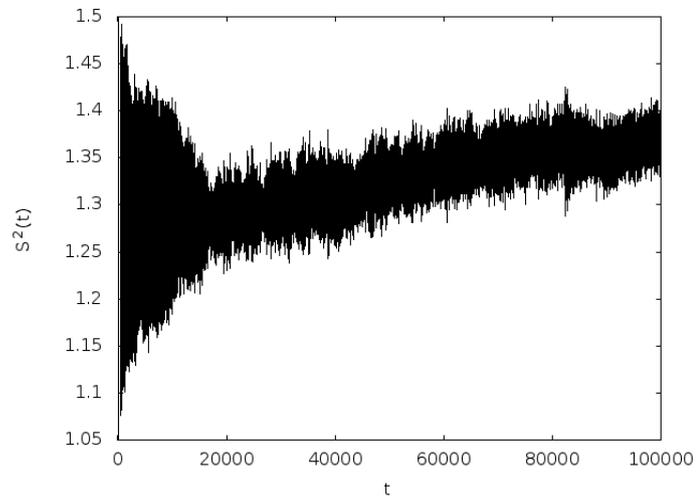


Figura 4.16: Evolução temporal da variância empírica das PAE para um sistema de $N = 10^5$. Sistema com condição inicial do tipo *waterbag* com $p_0 = 1.0$.

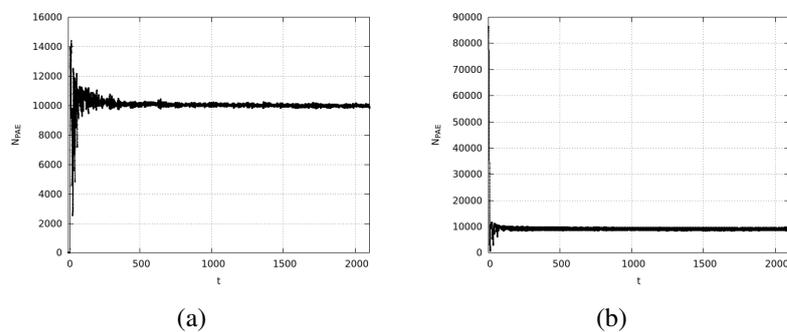


Figura 4.17: Evolução temporal do número de PAE para um sistema de $N = 10^5$. Sistema com condição inicial do tipo *waterbag* com (a) $p_0 = 0$ e (b) $p_0 = 1.0$.

5 *Modelo HMF com duas espécies*

Neste capítulo propomos um modelo simplificado de interação de partículas carregadas em uma dimensão. A interação é dada por um potencial semelhante ao potencial do modelo hamiltoniano de Campo Médio (HMF) (4.2.1) do capítulo anterior mas, aqui, a interação entre partículas de mesma carga é repulsiva, enquanto entre partículas de cargas diferentes é atrativa. O objetivo é estudar um modelo simplificado de interação Coulombiana em uma dimensão.

5.1 Caracterização dinâmica do sistema

A hamiltoniana que descreve este sistema é dada por

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} - \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^N e_i e_j [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)], \quad (5.1.1)$$

onde

$$e_i = \begin{cases} +1 & \text{se } 1 \leq i \leq N_1 \\ -1 & \text{se } N_1 < i \leq N, \end{cases}$$

$$m_i = \begin{cases} M & \text{se } 1 \leq i \leq N_1 \\ m & \text{se } N_1 < i \leq N, \end{cases}$$

e o par conjugado (θ_i, p_i) representa, respectivamente a posição da i -ésima partícula no anel $S_{2\pi}$ e seu momento. Assumimos que há duas espécies de partículas no sistema: N_1 partículas com carga $e_i = 1$ e $N_2 = N - N_1$ partículas com carga $e_i = -1$. Logo, as equações de movimento para a i -ésima partícula são dadas por

$$\begin{aligned} \dot{\theta}_i &= \frac{p_i}{m_i} \\ \dot{p}_i &= \frac{1}{N} \sum_j e_i e_j \sin(\theta_i - \theta_j) \end{aligned} \quad (5.1.2)$$

Definimos as quantidades de campo médio (usamos, também, o termo magnetizações)

$$\mathbf{M}_1 = \left(\frac{1}{N_1} \sum_i^{N_1} \cos \theta_i, \frac{1}{N_1} \sum_i^{N_1} \sin \theta_i \right) \quad (5.1.3)$$

$$\mathbf{M}_2 = \left(\frac{1}{N_2} \sum_{i=N_1+1}^{N_2} \cos \theta_i, \frac{1}{N_2} \sum_{i=N_1+1}^{N_2} \sin \theta_i \right), \quad (5.1.4)$$

para reescrever

$$\dot{p}_i = e_i \left[\sin \theta_i (c_1 M_{1x} - c_2 M_{2x}) - \cos \theta_i (c_1 M_{1y} - c_2 M_{2y}) \right] \quad (5.1.5)$$

e

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} - \frac{1}{2} \frac{(N_1 - N_2)^2}{N} + \frac{N}{2} \left[(c_1 M_{1x} - c_2 M_{2x})^2 + (c_1 M_{1y} - c_2 M_{2y})^2 \right], \quad (5.1.6)$$

onde usamos as razões $c_i = \frac{N_i}{N}$.

Podemos simplificar a notação introduzindo o vetor

$$\mathbf{A} = c_1 \mathbf{M}_1 - c_2 \mathbf{M}_2, \quad (5.1.7)$$

com o qual obtemos

$$\dot{p}_i = e_i (\sin \theta_i A_x - \cos \theta_i A_y) \quad (5.1.8)$$

e

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} - \frac{1}{2} \frac{(N_1 - N_2)^2}{N} + \frac{N}{2} (A_x^2 + A_y^2). \quad (5.1.9)$$

Vemos, então, que o vetor \mathbf{A} se comporta como um campo médio atuando nas partículas, uma vez que, na equação de evolução da partícula i (5.1.8), toda a informação sobre interação com todas as partículas está nos termos A_x e A_y .

5.2 Equilíbrio

Para calcular as propriedades de equilíbrio do sistema, usamos a função $f^{(i)}(p, \theta, t)$, que descreve a densidade de probabilidade de encontrar uma partícula da espécie i em um volume infinitesimal do espaço (θ, p) , onde $i = 1, 2$. Estas distribuições são normalizadas, logo

$$I^{(i)} = \int f^{(i)} dp d\theta = 1. \quad (5.2.1)$$

A energia por partícula é escrita em função das distribuições $f^{(i)}$ na forma

$$\begin{aligned}
 e = \frac{E}{N} = & c_1 \overbrace{\int f^{(1)} \frac{p^2}{2M} dp d\theta}^{k_1} + c_2 \overbrace{\int f^{(2)} \frac{p^2}{2m} dp d\theta}^{k_2} \\
 & - \frac{c_1^2}{2} \int [1 - \cos(\theta - \theta')] f^{(1)} f'^{(1)} dp d\theta dp' d\theta' \\
 & - \frac{c_2^2}{2} \int [1 - \cos(\theta - \theta')] f^{(2)} f'^{(2)} dp d\theta dp' d\theta' \\
 & - c_1 c_2 \int [1 - \cos(\theta - \theta')] f^{(1)} f'^{(2)} dp d\theta dp' d\theta'. \quad (5.2.2)
 \end{aligned}$$

Novamente, introduzimos as quantidades de campo médio

$$M_{x,y}^{(i)} = \int f^{(i)}(\cos \theta, \sin \theta) dp d\theta, \quad (5.2.3)$$

com as quais escrevemos

$$e = c_1 k_1 + c_2 k_2 - \frac{1}{2}(c_1 - c_2)^2 + \frac{1}{2}(c_1 \mathbf{M}_1 - c_2 \mathbf{M}_2)^2. \quad (5.2.4)$$

Encontramos a configuração de equilíbrio ao maximizar a entropia de Gibbs

$$S = - \int f_N \log f_N \prod_i dp_i d\theta_i \quad (5.2.5)$$

sujeita ao vínculo da conservação da energia (5.2.2) e do número de partículas (5.2.1). A função de distribuição f_N a N partículas pode ser escrita como

$$f_N = \prod_{i=1}^{N_1} f^{(1)}(p_i, \theta_i) \prod_{j=N_1+1}^N f^{(2)}(p_j, \theta_j), \quad (5.2.6)$$

se assumirmos que as partículas são estatisticamente independentes (sistema sem correlações).

Com esta hipótese, temos

$$\begin{aligned}
 S = & - \sum_{i=1}^{N_1} \int f^{(1)}(p_i, \theta_i) \log f^{(1)}(p_i, \theta_i) dp_i d\theta_i \\
 & - \sum_{i=N_1+1}^N \int f^{(2)}(p_i, \theta_i) \log f^{(2)}(p_i, \theta_i) dp_i d\theta_i. \quad (5.2.7)
 \end{aligned}$$

Com esta expressão, temos a entropia por partícula

$$s = \frac{S}{N} = c_1 s^{(1)} + c_2 s^{(2)}, \quad (5.2.8)$$

com

$$s^{(i)} = - \int f^{(i)}(p, \theta) \log f^{(i)}(p, \theta) dp d\theta \quad (5.2.9)$$

Para encontrar a configuração de equilíbrio, maximizamos s com relação às variações das $f^{(i)}$ sujeitas aos vínculos de conservação da energia (5.2.2) e do número de partículas (5.2.1). Portanto, uma variação na forma

$$f^{(i)} \longrightarrow f^{(i)} + \delta f^{(i)} \quad (5.2.10)$$

gera uma variação na entropia por partícula dada por

$$\delta s = -c_1 \int [\log f^{(1)} + 1] \delta f^{(1)} dp d\theta - c_2 \int [\log f^{(2)} + 1] \delta f^{(2)} dp d\theta, \quad (5.2.11)$$

com as respectivas variações no número de partículas

$$\delta I^{(i)} = \int \delta f^{(i)} dp d\theta = 0 \quad (5.2.12)$$

e na energia por partícula

$$\begin{aligned} \delta e = & c_1 \int \delta f^{(1)} \frac{p^2}{2M} dp d\theta + c_2 \int \delta f^{(2)} \frac{p^2}{2m} dp d\theta \\ & + c_1^2 \int \cos(\theta - \theta') f^{(1)} \delta f'^{(1)} dp d\theta dp' d\theta' \\ & + c_2^2 \int \cos(\theta - \theta') f^{(2)} \delta f'^{(2)} dp d\theta dp' d\theta' \\ & - c_1 c_2 \int \cos(\theta - \theta') [f^{(1)} \delta f'^{(2)} + f^{(2)} \delta f'^{(1)}] dp d\theta dp' d\theta' = 0. \end{aligned} \quad (5.2.13)$$

Introduzindo os multiplicadores de Lagrange β e $\lambda^{(i)}$, a condição de máximo da entropia pode ser escrita como

$$\delta s - \beta \delta e - \lambda^{(1)} \delta I^{(1)} - \lambda^{(2)} \delta I^{(2)} = 0. \quad (5.2.14)$$

Como as variações $\delta f^{(i)}$ são arbitrárias, esta última expressão nos fornece duas equações: uma para os coeficientes de $\delta f^{(1)}$ e outra para os coeficientes de $\delta f^{(2)}$. A primeira destas nos fornece

$$c_1 (\log f^{(1)} + 1) + \lambda^{(1)} + \beta \left\{ c_1 \frac{p^2}{2M} + c_1^2 [M_x^{(1)} \cos \theta + M_y^{(1)} \sin \theta] - c_1 c_2 [M_x^{(2)} \cos \theta + M_y^{(2)} \sin \theta] \right\} = 0 \quad (5.2.15)$$

Definimos

$$e^{(1)} \equiv \frac{p^2}{2M} + c_1 [M_x^{(1)} \cos \theta + M_y^{(1)} \sin \theta] - c_2 [M_x^{(2)} \cos \theta + M_y^{(2)} \sin \theta] \quad (5.2.16)$$

para reescrever a equação (5.2.15) na forma

$$\log f^{(1)} = -1 - \frac{\lambda^{(1)}}{c_1} - \beta e^{(1)}. \quad (5.2.17)$$

Portanto, a distribuição de partículas da espécie 1, no equilíbrio, é dada por

$$\begin{aligned} f^{(1)}(p, \theta) &= e^{-\frac{\lambda^{(1)}}{c_1} - 1} e^{-\beta e^{(1)}} \\ &= C^{(1)} e^{-\beta e^{(1)}}. \end{aligned} \quad (5.2.18)$$

onde $C^{(1)} = e^{-\frac{\lambda^{(1)}}{c_1} - 1}$.

De maneira análoga, a equação para variações arbitrárias $\delta f^{(2)}$ nos dá

$$\begin{aligned} f^{(2)}(p, \theta) &= e^{-\frac{\lambda^{(2)}}{c_2} - 1} e^{-\beta e^{(2)}} \\ &= C^{(2)} e^{-\beta e^{(2)}}. \end{aligned} \quad (5.2.19)$$

Para conhecer completamente o comportamento das funções $f^{(i)}$ no equilíbrio, precisamos ainda conhecer as magnetizações $M^{(i)}$. Para tal, substituímos as funções (5.2.18) e (5.2.19) na definição (5.2.3) e obtemos

$$M_x^{(1)} = \hat{C}_1 \int \cos \theta e^{-\beta A_x \cos \theta} e^{-\beta A_y \sin \theta} d\theta \quad (5.2.20)$$

$$M_y^{(1)} = \hat{C}_1 \int \sin \theta e^{-\beta A_x \cos \theta} e^{-\beta A_y \sin \theta} d\theta \quad (5.2.21)$$

$$M_x^{(2)} = \hat{C}_2 \int \cos \theta e^{\beta A_x \cos \theta} e^{\beta A_y \sin \theta} d\theta \quad (5.2.22)$$

$$M_y^{(2)} = \hat{C}_2 \int \sin \theta e^{\beta A_x \cos \theta} e^{\beta A_y \sin \theta} d\theta, \quad (5.2.23)$$

onde usamos a definição (5.1.7) e introduzimos a constante de normalização

$$\hat{C}_{1,2} = \int C^{(1,2)} e^{-\beta \frac{p^2}{2M_{1,2}}} dp. \quad (5.2.24)$$

Podemos escrever o vetor \mathbf{A} em coordenadas polares com um ângulo polar φ definido pelas relações

$$A_x = A \cos \varphi \quad (5.2.25)$$

$$A_y = A \sin \varphi. \quad (5.2.26)$$

Desta forma, reescrevemos as magnetizações no equilíbrio¹

$$M_x^{(1)} = \hat{C}_1 \int \cos \theta e^{-\beta A \cos(\theta-\varphi)} d\theta = \hat{C}_1 2\pi I_1(-\beta A) \quad (5.2.27)$$

$$M_y^{(1)} = \hat{C}_1 \int \sin \theta e^{-\beta A \cos(\theta-\varphi)} d\theta = 0 \quad (5.2.28)$$

$$M_x^{(2)} = \hat{C}_2 \int \cos \theta e^{\beta A \cos(\theta-\varphi)} d\theta = \hat{C}_2 2\pi I_1(\beta A) \quad (5.2.29)$$

$$M_y^{(2)} = \hat{C}_2 \int \sin \theta e^{\beta A \cos(\theta-\varphi)} d\theta = 0, \quad (5.2.30)$$

onde I_n é a função de Bessel modificada de ordem n . A normalização de (5.2.3) determina as constantes

$$\hat{C}_1 = \left(\int e^{-\beta A_x \cos \theta} e^{-\beta A_y \sin \theta} d\theta \right)^{-1} = (2\pi I_0(-\beta A))^{-1} \quad (5.2.31)$$

$$\hat{C}_2 = \left(\int e^{\beta A_x \cos \theta} e^{\beta A_y \sin \theta} d\theta \right)^{-1} = (2\pi I_0(\beta A))^{-1}. \quad (5.2.32)$$

Logo, temos

$$M_x^{(1)} = -M_x^{(2)} = A = -\frac{I_1(\beta A)}{I_0(\beta A)} \quad (5.2.33)$$

Finalmente, substituindo o resultado (5.2.33) nas distribuições de equilíbrio (5.2.18) e (5.2.19), temos

$$f^{(1)} = C^{(1)} e^{-\beta \left(\frac{p^2}{2M} + A \cos \theta \right)} \quad (5.2.34)$$

$$\begin{aligned} f^{(2)} &= C^{(2)} e^{-\beta \left(\frac{p^2}{2m} - A \cos \theta \right)} \\ &= C^{(2)} e^{-\beta \left(\frac{p^2}{2m} + A \cos(\theta+\pi) \right)}, \end{aligned} \quad (5.2.35)$$

onde o valor de A é dado pela solução da equação auto-consistente (5.2.33).

5.3 Resultados Numéricos

Realizamos simulações de dinâmica molecular do sistema hamiltoniano de Campo Médio com evolução dada por (5.1.1) para analisar a distribuição no estado de equilíbrio. A evolução temporal do sistema é feita com o integrador simplético de Yoshida de quarta ordem [48].

Partindo de uma condição inicial de “waterbag” com $p_0 = 1/2$ e $\theta_0 = \pi$, plotamos o retrato de fase do sistema com $N = 10^4$ partículas em tempos diferentes na figura 5.1.

¹Note que a escolha de φ é arbitrária, uma vez que diz respeito apenas à escolha da origem dos ângulos.

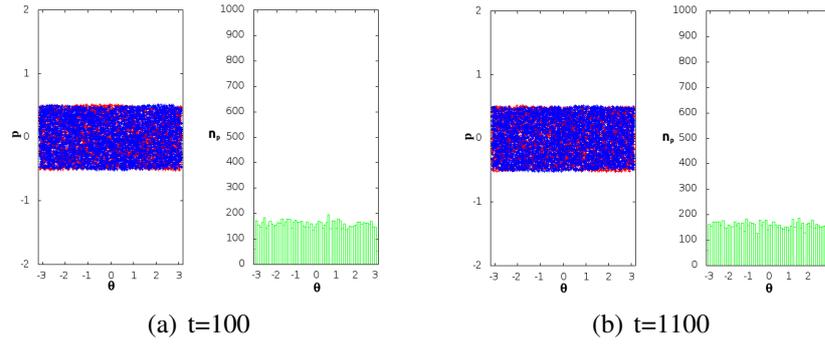


Figura 5.1: Retrato de fases do sistema dado por (5.1.1). Por simplicidade, usamos $N_1 = N_2$ e $M = m = 1$.

A figura mostra dois tipos de gráficos: o retrato de fases $p \times \theta$ à esquerda e uma medida da distribuição angular $n_p \times \theta$ à direita, onde $n_p(\theta)$ é uma contagem do número de partículas na vizinhança da posição θ . Notamos que o sistema permanece na fase homogênea por tempos muito longos. Isto não contradiz o resultado expresso pelas equações (5.2.34) e (5.2.35), uma vez que a expressão (5.2.33) admite como solução física apenas $A = 0$ [10], resultando em uma distribuição homogênea no espaço dos ângulos θ ($f^{(i)}$ independente de θ).

Para mostrar que $A = 0$ é a única solução de interesse, definimos a variável $x \equiv \beta A$ para $0 < \beta < \infty$, de tal maneira que

$$A = A(x) = -\frac{I_1(x)}{I_0(x)} = \frac{x}{\beta}. \quad (5.3.1)$$

Logo, podemos resolver (5.3.1) por uma construção geométrica, obtendo as soluções como pontos de interseção entre as curvas $A(x) = -\frac{I_1(x)}{I_0(x)}$ e $\frac{x}{\beta}$. Apresentamos essa construção na figura 5.2, para diferentes valores de β .

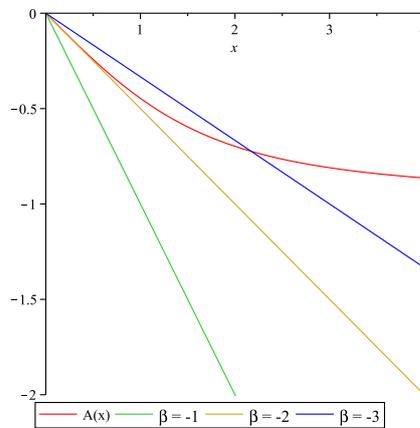


Figura 5.2: Construção geométrica da solução da equação (5.3.1).

Como esperado, para qualquer valor de β , vemos que as curvas se interceptam na origem,

i.e., que $A = 0$ é sempre solução. Outros pontos de interceptação existem, apenas, para valores negativos de β (temperaturas negativas), o que não faz sentido físico para nosso sistema. Logo, não há um valor de β positivo caracterizando uma transição² de um estado de equilíbrio homogêneo, com $A = 0$ para um não-homogêneo, com $A \neq 0$.

5.3.1 Regime de baixas energias

Partindo de uma condição inicial de “waterbag” com $p_0 = 0$, o sistema tem energia total por partícula³ da ordem de $e = 10^{-5}$. Neste caso, o sistema atinge uma configuração de equilíbrio não-termodinâmico de longa duração diferente daquela previsto pelas equações (5.2.34) e (5.2.35). Esta configuração é caracterizada por dois picos na distribuição angular, distantes de um valor de π , conforme ilustrado na figura 5.3.

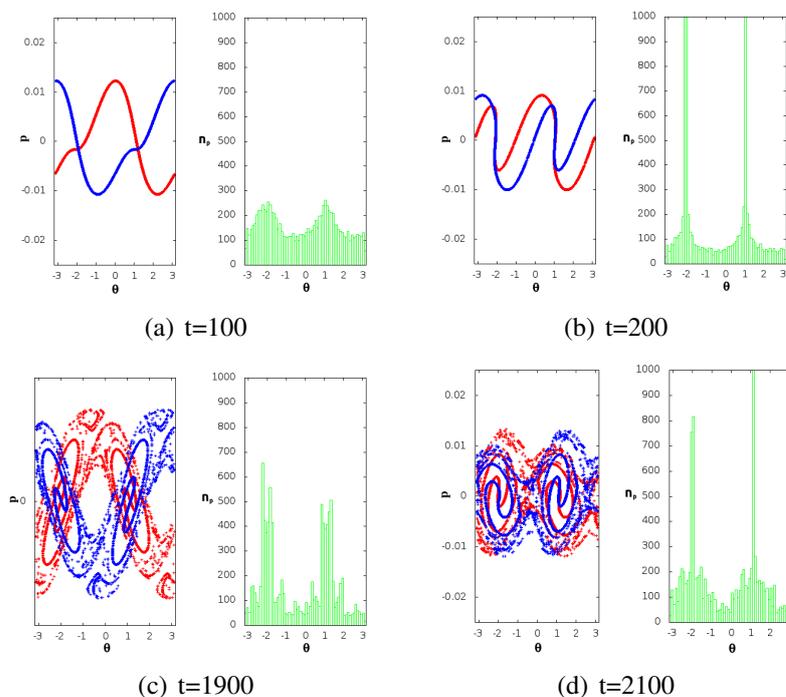


Figura 5.3: Retrato de fases do sistema a baixas energias para diferentes tempos computacionais. Partículas de diferentes espécies são ilustradas por diferentes cores no retrato de fases. Note a escala de variação de p , da ordem de 10^{-2} .

Note que as expressões de equilíbrio (5.2.34) e (5.2.35) preveem os picos das distribuições

²O valor de β na transição poderia ser calculado como o valor crítico β_c no qual $x \rightarrow 0$, o que nos fornece

$$\frac{1}{\beta_c} = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{A(x)}{x} = \lim_{x \rightarrow 0} \left(-\frac{I_1(x)}{I_0(x)} \right) \frac{1}{x} = -\frac{1}{2}. \quad (5.3.2)$$

³Em unidades arbitrárias de simulação - massas e todas as constantes universais foram consideradas como unitárias.

das duas espécies distantes de um valor de π . Entretanto, o resultado ilustrado na figura 5.3, não deve ser entendido dessa maneira, uma vez que os picos na distribuição angular são, claramente, compostos por uma mistura de partículas de ambas as espécies. A formação da estrutura de “biclusters” neste tipo de sistema a baixas temperaturas é explicado, em [47], pela presença de ondas de choque nas equações hidrodinâmicas associadas ao limite $N \rightarrow \infty$.

5.3.2 Modelo de interação invertida

Para analisar a distribuição de equilíbrio prevista pela maximização da entropia em um caso não-homogêneo, e como exercício computacional, propomos um modelo semelhante ao anterior, em que trocamos o sinal da energia potencial, ou seja, partículas de mesma espécie se atraem enquanto as de espécies diferentes se repelem. A hamiltoniana deste novo modelo é dada por

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^N e_i e_j [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)]. \quad (5.3.3)$$

Notamos que o cálculo da condição de equilíbrio pela maximização da entropia é idêntico ao anterior, levando a expressões de equilíbrio iguais às expressões (5.2.34) e (5.2.35). Porém, a equação auto-consistente para o valor da “magnetização” A é dado, neste caso, por

$$A = \frac{I_1(\beta A)}{I_0(\beta A)}, \quad (5.3.4)$$

que admite soluções com $A \neq 0$ e $\beta > 0$. Vemos isso, novamente, por uma construção geométrica definindo a variável $x = \beta A$ e buscando pontos de interseção entre as curvas $A(x) = \frac{I_1(\beta A)}{I_0(\beta A)}$ e $\frac{x}{\beta}$.

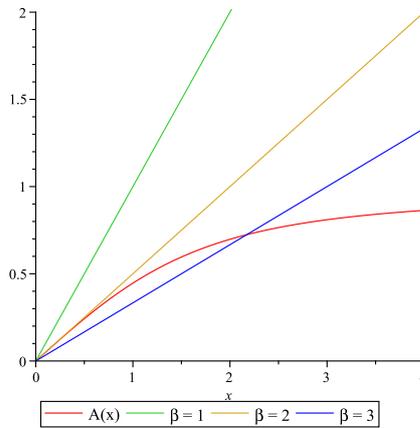


Figura 5.4: Construção geométrica da solução da equação (5.3.4).

A figura 5.3.4 nos mostra que existem pontos de interseção fora da origem para certos valores de β . Este valor (β_c) caracteriza a transição entre um estado de equilíbrio homogêneo

($A = 0$) e um não-homogêneo ($A \neq 0$) e pode ser calculado como o valor crítico β_c no qual $x \rightarrow 0$, o que nos fornece

$$\frac{1}{\beta_c} = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{A(x)}{x} = \lim_{x \rightarrow 0} \left(\frac{I_1(x)}{I_0(x)} \right) \frac{1}{x} = \frac{1}{2}. \quad (5.3.5)$$

Partindo de uma condição inicial de “waterbag” com $p_0 = 0$ e $\theta_0 = \pi$, plotamos o retrato de fase do sistema com $N = 10^4$ partículas em um tempo de simulação $t = 200$ na figura 5.5.

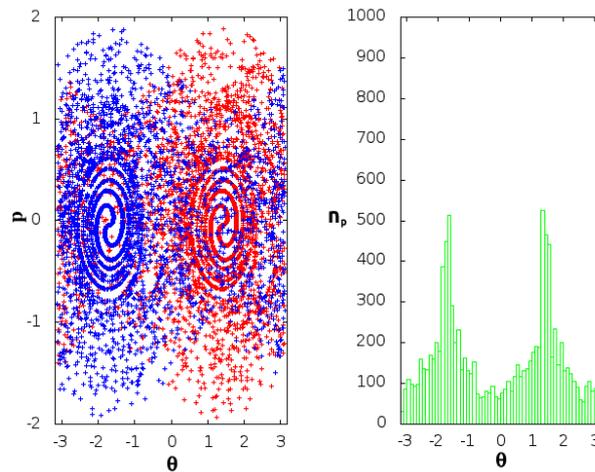


Figura 5.5: Retrato de fases do sistema caracterizado pela hamiltoniana (5.3.3) no estado de equilíbrio quasi-estacionário.

Observamos a presença de dois picos formados por aglomerações de partículas de mesma espécie, de acordo com o previsto nas expressões (5.2.34) e (5.2.35), com a magnetização A dada pela solução de (5.3.4).

6 *Conclusões e Perspectivas*

Nossos resultados dão base teórica para o uso de abordagens dinâmicas de N -corpos para o estudo de sistemas de interação partícula-partícula e onda-partícula com condições de contorno fixas e não-periódicas. Esses resultados são importantes para assegurar a relevância de investigações numéricas de sistemas de plasmas, por exemplo, com números cada vez maiores de partículas.

Nossos resultados podem ser estendidos para o caso de muitas ondas e espécies diferentes de partículas. Podemos, também, incorporar um potencial fixo V_0 na definição de U em (2.3.62), adicionando uma força externa atuando nas partículas.

Como perspectiva de trabalho, queremos formular fontes de partículas no interior da região de interação Γ (ver Figura 2.1), simulando possíveis casos de colisões entre partículas. A dificuldade, nesse caso, será definir um fluxo T que leve em conta a *criação* de partículas em qualquer posição em Ω e não mude abruptamente o fluxo original descrevendo a evolução das medidas.

No limite de espectro de ondas denso, tomando o limite $N, M \rightarrow \infty$, a velocidade de uma partícula teste no campo das ondas eletrostáticas é descrita por um processo que é solução de uma equação diferencial estocástica gerada por um termo de ruído de Wiener em \mathbb{C} . Mostramos que essa equação tem solução única para tempos finitos.

Usamos um esquema de iteração de Picard para descrever a convergência à solução exata. Numericamente, plotamos as velocidades e posições da partícula teste usando um integrador simplético de segunda ordem para vários passos de Picard. Com estes resultados, obtemos um gráfico da distância entre soluções da equação diferencial, a qual se aproxima de zero conforme aumentamos o número de iterações de Picard. Os gráficos mostram um bom acordo entre os resultados analíticos e os numéricos.

Considerando apenas uma onda no modelo onda-partícula, as equações de movimento se assemelham àquelas do modelo Hamiltoniano de Campo Médio (HMF). Neste modelo, o caráter (atrativo ou repulsivo) do potencial influencia fortemente o comportamento dinâmico do sis-

tema. Para o caso de um potencial repulsivo, partindo de uma condição inicial “water-bag”, vemos que o sistema permanece em um estado homogêneo. Assumindo que as trajetórias das partículas seguem um movimento balístico com pequenas correções, mostramos que tais correções são de caráter Browniano no espaço das velocidades. A demonstração analítica é confirmada por simulações numéricas de dinâmica molecular. Nestas, é possível acompanhar as trajetórias individuais das partículas e computar os momentos da distribuição no espaço das velocidades para confirmar o caráter Browniano do movimento.

No caso atrativo, o sistema permanece por tempos longos em um estado não-homogêneo com formação de um aglomerado de partículas. Logo, não podemos assumir uma trajetória quase-balística para as partículas. Portanto, usamos uma abordagem puramente numérica para analisar o sistema. Observamos que partículas fora do aglomerado apresentam comportamento difusivo nas regiões mais externas do espaço de fase (partículas mais energéticas).

Como perspectiva de trabalho, temos a modelagem teórica do caso atrativo. Neste caso, a trajetória das partículas distantes do aglomerado central poderiam ser modeladas por funções elípticas dado o caráter pendular da equação de movimento.

Finalmente, apresentamos o modelo HMF de duas espécies como modelo simplificado de interação de partículas carregadas. Suas propriedades de equilíbrio são calculadas usando o método de maximização da entropia. Simulações numéricas mostram que, de acordo com as previsões teóricas, o modelo permanece em um estado homogêneo de equilíbrio. Entretanto, para energias baixas, observamos a formação de uma estrutura com dois aglomerados no espaço de fases. Os aglomerados são formados por uma superposição de duas estruturas pulsantes, cada uma composta por apenas uma das espécies do sistema.

Como extensão do modelo, apresentamos o modelo HMF de duas espécies com interação invertida, ou seja, simplesmente mudamos o sinal do potencial na Hamiltoniana do sistema. Neste caso, o sistema permanece em um estado de quase-equilíbrio caracterizado pela formação de dois aglomerados no espaço de fases, distantes de π no espaço das posições. Cada aglomerado é composto por uma única espécie de partícula e sua formação independe da energia do sistema, dada uma condição inicial fora do equilíbrio.

APÊNDICE A – A equação de Vlasov

A evolução de partículas interagentes em um sistema clássico é dada pelas equações de Newton, que determinam as posições e as velocidades de cada partícula em cada instante. Equivalentemente, a dinâmica de tal sistema é determinada completamente se conhecermos sua função Hamiltoniana e as respectivas variáveis conjugadas. Entretanto, quando o número de partículas no sistema tende ao infinito, é impossível acompanhar a dinâmica individual de cada uma delas. Neste caso, estamos interessados na probabilidade de encontrar um conjunto de partículas com posição e velocidade determinadas, o que é suficiente para calcular médias macroscópicas do sistema. A equação que governa a evolução dessa probabilidade é conhecida como equação de Liouville [7, 8] e sua solução é tão complicada quanto o sistema Hamiltoniano original. Porém, o objetivo da teoria cinética é encontrar aproximações apropriadas, fisicamente justificáveis, que tornem a equação solúvel.

A.1 Equação cinética

Considere a Hamiltoniana

$$H = \sum_i^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N V(|x_i - x_j|) \quad (\text{A.1.1})$$

descrevendo um sistema de N partículas de massa unitária interagindo através do potencial $V(r)$, r sendo a distância entre partículas. p_i é o momento conjugado à posição x_i da i -ésima partícula e suas evoluções são dadas por

$$\begin{aligned} \dot{x}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} = p_i \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial x_i} = -\sum_{j \neq i} \frac{d}{dx_i} V(|x_i - x_j|). \end{aligned} \quad (\text{A.1.2})$$

Para descrever o estado do sistema, podemos projetar todas as posições e momentos no espaço das posições e momentos de uma partícula (espaço μ , ou espaço de fases. Ver, por exemplo

figuras 4.2(a) e 4.3(a)).

Alternativamente, podemos descrever o sistema através de uma distribuição de N partículas com suporte no espaço de fases. Representamos essa distribuição pela função $f^N(X, P)$, onde (X, P) representa o conjunto completo de todas as posições e momentos $\{(x_i, p_i)\}$. Esta função depende do tempo através da evolução dinâmica do sistema, mas, para simplificar a notação, deixaremos essa dependência implícita em $f^N(X, P)$. Logo, a cada instante, a probabilidade do sistema de N partículas se encontrar com posições e momentos em um volume $dXdP$ em torno de (X, P) é dada por $f^N(X, P)dXdP$. A evolução de f^N é governada pela equação de Liouville [7, 8]

$$\frac{\partial}{\partial t} f^N(X, P) = \mathcal{L} f^N(X, P), \quad (\text{A.1.3})$$

onde o operador Liouvilliano \mathcal{L} é definido por meio de parênteses de Poisson como

$$\mathcal{L}(\bullet) = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{\partial H}{\partial x_i} \frac{\partial(\bullet)}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial(\bullet)}{\partial x_i} \right\}. \quad (\text{A.1.4})$$

Se estamos interessados na evolução de uma única partícula, precisamos reduzir o espaço de suporte de f^N . Para tal, podemos definir funções de distribuição reduzidas a s partículas como

$$f_s((x_1, p_1), \dots, (x_s, p_s)) = \frac{N!}{(N-s)!} \int dx_{s+1} dp_{s+1} \dots dx_N dp_N f^N(X, P). \quad (\text{A.1.5})$$

Se as partículas são totalmente não correlacionadas (estatisticamente), podemos escrever uma função de distribuição reduzida na forma

$$f_s^{nc}((x_1, p_1), \dots, (x_s, p_s)) \propto \prod_{j=1}^s f_1(x_j, p_j). \quad (\text{A.1.6})$$

Se levarmos em consideração correlações entre duas partículas como uma medida do desvio do comportamento ideal expresso por (A.1.6), escrevemos

$$f_2((x_1, p_1), (x_2, p_2)) = f_1(x_1, p_1) f_1(x_2, p_2) + g_2((x_1, p_1), (x_2, p_2)), \quad (\text{A.1.7})$$

onde a função g_2 é a medida da correlação entre duas partículas.

A evolução da função de distribuição a uma partícula f_1 pode ser obtida ao integrarmos a equação de Liouville (A.1.3) em $dx_2 dp_2 \dots dx_N dp_N$ e usarmos as definições (A.1.5) e (A.1.7).

Dessa forma, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f_1(x_1, p_1) + p_1 \frac{\partial}{\partial x_1} f_1(x_1, p_1) = \\ \int dx_2 dp_2 \frac{\partial}{\partial x_1} V(|x_1 - x_2|) \cdot \frac{\partial}{\partial p_1} f_1(x_1, p_1) f_1(x_2, p_2) \\ + \int dx_2 dp_2 \frac{\partial}{\partial x_1} V(|x_1 - x_2|) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial p_1} - \frac{\partial}{\partial p_2} \right) g_2((x_1, p_1), (x_2, p_2)). \end{aligned} \quad (\text{A.1.8})$$

A.2 Limite de Vlasov

O primeiro termo do lado direito da equação (A.1.8) é chamado de *termo de Vlasov*. Este é o termo responsável pela aceleração das partículas e pode ser visto como uma média, no espaço de fases, da força entre as partículas derivada do potencial V . O último termo é visto como um termo de colisão, uma vez que depende da correlação g_2 . Note que esta **não** é uma equação fechada para f_1 uma vez que precisamos de uma segunda equação para determinar a evolução de g_2 .

Em sistemas de longo alcance, entretanto, podemos assumir que o potencial de interação é fraco, $V(r) = O(\lambda)$, onde λ é um parâmetro pequeno. Dessa forma, estabelecemos as ordens de grandeza

$$f_1(x, p) = O(\lambda^0); \quad g_2 = O(\lambda^1). \quad (\text{A.2.1})$$

Mantendo apenas termos de ordem λ^1 na equação (A.1.8) e omitindo o índice 1, obtemos a *equação de Vlasov* na forma

$$\frac{\partial f}{\partial t} + p \frac{\partial f}{\partial x} + F[f, V] \frac{\partial f}{\partial p} = 0, \quad (\text{A.2.2})$$

onde introduzimos a *força média* auto-consistente

$$F[f, V] = \int dx' dp' f(x', p') \frac{d}{dx} V(|x - x'|). \quad (\text{A.2.3})$$

A dependência de F com f torna a equação de Vlasov não-linear e extremamente difícil de se resolver. Para acoplamento fraco, Braun e Hepp [15] mostraram a convergência (fraca) do problema dinâmico original descrito pelo sistema (A.1.2) à equação de Vlasov (A.2.2) no limite $N \rightarrow \infty$.

APÊNDICE B – Teoria das equações diferenciais ordinárias - Existência e unicidade

Neste apêndice veremos, brevemente, as principais características de sistemas de equações diferenciais ordinárias. Focamos no desenvolvimento de métodos de determinação de existência de soluções, bem como de métodos iterativos de obtenção de soluções.

B.1 Propriedades básicas

Um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs) de primeira ordem é representado por

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = X_1(x_1, \dots, x_n; t) \\ \vdots \\ \frac{dx_n}{dt} = X_n(x_1, \dots, x_n; t). \end{cases} \quad (\text{B.1.1})$$

Uma equação diferencial de ordem n

$$\frac{d^n x}{dt^n} = F\left(t; x, \frac{dx}{dt}, \dots, \frac{d^{n-1}x}{dt^{n-1}}\right), \quad (\text{B.1.2})$$

pode ser reduzida à forma (B.1.1) se definirmos $x_1 = x$, $x_2 = \frac{dx}{dt}$, ..., $x_n = \frac{d^{n-1}x}{dt^{n-1}}$. Dessa forma, a equação (B.1.2) é equivalente ao sistema

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = x_2 \\ \vdots \\ \frac{dx_{n-1}}{dt} = x_n \\ \frac{dx_n}{dt} = F(t; x_1, \dots, x_n). \end{cases} \quad (\text{B.1.3})$$

Podemos escrever o sistema (B.1.1) na forma vetorial

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{X}(\mathbf{x};t), \quad (\text{B.1.4})$$

onde o vetor $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ e a função vetorial $\mathbf{X}(\mathbf{x};t) = (X_1(x_1, \dots, x_n; t), \dots, X_n(x_1, \dots, x_n; t))$.

Para qualquer vetor \mathbf{x} , definimos sua norma como

$$\|\mathbf{x}\| = \sqrt{x_1^2 + \dots + x_n^2}, \quad (\text{B.1.5})$$

e o produto interno deste com outro vetor $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)$ como

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = x_1 y_1 + \dots + x_n y_n. \quad (\text{B.1.6})$$

Destas definições, seguem a desigualdade triangular,

$$\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|, \quad (\text{B.1.7})$$

e a desigualdade de Schwarz

$$\|\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| \cdot \|\mathbf{y}\|. \quad (\text{B.1.8})$$

Para uma função vetorial $\mathbf{x}(t) = (x_1(t), \dots, x_n(t))$, temos as operações

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = (\dot{x}_1(t), \dots, \dot{x}_n(t)) \quad (\text{B.1.9})$$

e

$$\int_a^b \mathbf{x}(t) dt = \left(\int_a^b x_1(t) dt, \dots, \int_a^b x_n(t) dt \right). \quad (\text{B.1.10})$$

Temos, também, a seguinte desigualdade auxiliar

$$\left\| \int_a^b \mathbf{x}(t) dt \right\| \leq \int_a^b \|\mathbf{x}(t)\| dt. \quad (\text{B.1.11})$$

Apenas poucos tipos de equações diferenciais podem ser resolvidas em termos de funções elementares. Portanto, neste apêndice vamos explorar as condições em \mathbf{X} para que o sistema (B.1.4) possua solução. Além disso, partindo de determinada condição inicial, estamos interessados em saber se a solução é única.

DEFINIÇÃO B.1.1 *Uma função vetorial $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$ satisfaz a condição de Lipschitz em uma região \mathcal{R} do espaço (\mathbf{x}, t) se, para alguma constante L (chamada de constante de Lipschitz), temos*

$$\|\mathbf{X}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{X}(\mathbf{y}, t)\| \leq L \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|, \quad (\text{B.1.12})$$

para $(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{R}$ e $(\mathbf{y}, t) \in \mathcal{R}$.

B.2 Teorema da unicidade

Nesta seção, provamos o seguinte teorema

TEOREMA B.2.1 (Teorema da unicidade) *Se o campo vetorial $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$ satisfaz uma condição de Lipschitz em um domínio \mathcal{R} , então existe no máximo uma solução $\mathbf{x}(t)$ do sistema diferencial*

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{X}(\mathbf{x}, t), \quad (\text{B.2.1})$$

com dada condição inicial $\mathbf{x}(a) = \mathbf{c}$ em \mathcal{R} .

◇ **Demonstração:** Assumimos que $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$ satisfaz uma condição de Lipschitz com constante L . Sejam $\mathbf{x}(t) = (x_1(t), \dots, x_n(t))$ e $\mathbf{y}(t) = (y_1(t), \dots, y_n(t))$ duas soluções de (B.2.1) com mesma condição inicial $\mathbf{x}(a) = \mathbf{c} = \mathbf{y}(a)$.

Definimos

$$\sigma(t) = \|\mathbf{x}(t) - \mathbf{y}(t)\|^2 = \sum_{k=1}^n [x_k(t) - y_k(t)]^2 \geq 0. \quad (\text{B.2.2})$$

Logo,

$$\begin{aligned} \sigma'(t) &= \sum_{k=1}^n 2 [x'_k(t) - y'_k(t)] \cdot [x_k(t) - y_k(t)] \\ &= \sum_{k=1}^n 2 [X_k(\mathbf{x}(t), t) - X_k(\mathbf{y}(t), t)] \cdot [x_k(t) - y_k(t)] \\ &= 2 [\mathbf{X}(\mathbf{x}(t), t) - \mathbf{X}(\mathbf{y}(t), t)] \cdot [\mathbf{x}(t) - \mathbf{y}(t)], \end{aligned} \quad (\text{B.2.3})$$

onde o operador $'$ indica derivação temporal.

Usando a desigualdade de Schwarz,

$$\begin{aligned} \sigma'(t) &\leq |\sigma'(t)| = 2 |(\mathbf{X}(\mathbf{x}(t), t) - \mathbf{X}(\mathbf{y}(t), t)) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})| \\ &\leq \|\mathbf{X}(\mathbf{x}(t), t) - \mathbf{X}(\mathbf{y}(t), t)\| \cdot \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \\ &\leq 2L \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 = 2L\sigma(t). \end{aligned} \quad (\text{B.2.4})$$

Esta última desigualdade implica

$$\frac{d}{dt}(\sigma(t)e^{-2Lt}) = (\sigma'(t) - 2L\sigma(t))e^{-2Lt} \leq 0. \quad (\text{B.2.5})$$

Portanto, $\sigma(t)e^{-2Lt}$ é uma função decrescente. Ou seja, para $t > a$, $\sigma(t)e^{-2Lt} \leq \sigma(a)e^{-2La} = 0$. Como $\sigma(t) \geq 0$, temos $\sigma(t) = 0$ para todo $t \geq a$, isto é, $\mathbf{x}(t) = \mathbf{y}(t)$ para todo $t \geq a$. \square

Com este resultado, podemos diretamente obter o seguinte teorema.

TEOREMA B.2.2 (Teorema da continuidade) *Sejam $\mathbf{x}(t)$ e $\mathbf{y}(t)$ quaisquer duas soluções da equação diferencial (B.2.1) em $T_1 \leq t \leq T_2$, em que $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$ é contínuo e satisfaz uma condição de Lipschitz com constante L em uma região \mathcal{R} . Então,*

$$\|\mathbf{x}(t) - \mathbf{y}(t)\| \leq e^{L|t-a|} \|\mathbf{x}(a) - \mathbf{y}(a)\|, \quad (\text{B.2.6})$$

para todo $a, t \in [T_1, T_2]$.

\diamond **Demonstração:** Vamos assumir que $t \geq a$. Então, para a função $\sigma(t) = \|\mathbf{x}(t) - \mathbf{y}(t)\|^2$, temos, de acordo com a demonstração do teorema anterior

$$\sigma'(t) \leq 2L\sigma(t), \quad (\text{B.2.7})$$

que implica

$$\frac{d}{dt}(\sigma(t)e^{-2Lt}) \leq 0. \quad (\text{B.2.8})$$

Integrando esta desigualdade de a a t , obtemos

$$\sigma(t)e^{-2Lt} \leq \sigma(a)e^{-2La}, \quad (\text{B.2.9})$$

que gera a desigualdade desejada. \square

B.3 Teorema da existência

Nesta seção vamos estudar a existência de soluções para a equação (B.2.1). Nossa estratégia consiste em estabelecer uma equação integral equivalente para qualquer problema de valor inicial. Assim, procuramos mostrar que a iteração do operador integral converge à uma solução.

TEOREMA B.3.1 *Seja $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$ uma função contínua. Então, a função $\mathbf{x}(t)$ é uma solução do problema de valor inicial*

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{X}(\mathbf{x}, t) \\ \mathbf{x}(a) = \mathbf{c} \end{cases} \quad (\text{B.3.1})$$

se, e somente se, for solução da equação integral

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{c} + \int_a^t \mathbf{X}(\mathbf{x}(s), s) ds. \quad (\text{B.3.2})$$

◇ **Demonstração:** A demonstração do teorema segue diretamente do Teorema Fundamental do Cálculo. □

Para uma dada $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$ contínua e definida para todo \mathbf{x} no intervalo $|t - a| \leq T$, podemos definir o operador U por

$$U(\mathbf{x}) = \mathbf{c} + \int_a^t \mathbf{X}(\mathbf{x}(s), s) ds. \quad (\text{B.3.3})$$

O domínio deste operador é dado por

$$\{\mathbf{x}(t) | \mathbf{x}(t) \text{ é contínua no intervalo } |t - a| \leq T\} \quad (\text{B.3.4})$$

e seu alcance (imagem) por

$$\{\mathbf{y}(t) | \mathbf{y}(t) \text{ é continuamente diferenciável no intervalo } |t - a| \leq T \text{ e } \mathbf{y}(a) = \mathbf{c}\}. \quad (\text{B.3.5})$$

Logo, uma solução da equação integral (B.3.2) é um ponto fixo do operador U :

$$\mathbf{x} = U(\mathbf{x}). \quad (\text{B.3.6})$$

Podemos reescrever o último teorema na forma

TEOREMA B.3.2 *Seja $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$ uma função contínua. Então a função $\mathbf{x}(t)$ é uma solução do problema de valor inicial (B.3.1) se, e somente se, o operador U definido por (B.3.3) tiver um ponto fixo em $C[a - T, a + T]$.*

Agora, podemos usar o operador U para gerar uma sequência de funções $\{\mathbf{x}^n\}$ a partir das condições iniciais por meio de iterações sucessivas:

$$\mathbf{x}^0(t) \equiv \mathbf{c}, \quad \mathbf{x}^n = U(\mathbf{x}^{n-1}) = U^n(\mathbf{x}^0), \quad n = 1, 2, \dots \quad (\text{B.3.7})$$

Este processo é conhecido como *iteração de Picard*.

Devemos, então, mostrar que, sujeita a algumas condições, uma iteração de Picard converge a uma solução do problema de valor inicial (B.3.1).

LEMA B.3.3 *Assuma que $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$ seja contínuo e satisfaça uma condição de Lipschitz com*

constante L no intervalo $|t - a| \leq T$ para todo \mathbf{x}, \mathbf{y} . Então, a iteração de Picard (B.3.7) converge uniformemente para $|t - a| \leq T$.

◇ **Demonstração:** Seja $M = \sup_{|t-a| \leq T} |\mathbf{X}(\mathbf{c}, t)| < \infty$. Sem perda de generalidade, assumimos que $a = 0$ e $t \geq a$. Ou seja, vamos demonstrar o lema no intervalo $0 \leq t \leq T$.

Primeiro, mostramos por indução que

$$\|\mathbf{x}^n(t) - \mathbf{x}^{n-1}(t)\| \leq \frac{(M/L)(Lt)^n}{n!}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (\text{B.3.8})$$

De fato, para $n = 1$

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x}^1(t) - \mathbf{x}^0(t)\| &= \left\| \int_0^t \mathbf{X}(\mathbf{x}^0(s), s) ds \right\| \\ &\leq \int_0^t \|\mathbf{X}(\mathbf{x}^0(s), s)\| ds \\ &\leq M \int_0^t ds = Mt = \frac{(M/L)(Lt)^1}{1!}. \end{aligned}$$

Para $n = 2$,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x}^2(t) - \mathbf{x}^1(t)\| &= \left\| \int_0^t [\mathbf{X}(\mathbf{x}^1(s), s) - \mathbf{X}(\mathbf{x}^0(s), s)] ds \right\| \\ &\leq \int_0^t \|\mathbf{X}(\mathbf{x}^1(s), s) - \mathbf{X}(\mathbf{x}^0(s), s)\| ds \\ &\leq L \int_0^t \|\mathbf{x}^1(s) - \mathbf{x}^0(s)\| ds \\ &\leq LM \int_0^t s ds = \frac{LMt^2}{2} = \frac{(M/L)(Lt)^2}{2!}. \end{aligned}$$

Assumimos que a desigualdade vale para qualquer $n = k$:

$$\|\mathbf{x}^k(t) - \mathbf{x}^{k-1}(t)\| \leq \frac{(M/L)(Lt)^k}{k!} \quad (\text{B.3.9})$$

Logo,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x}^{k+1}(t) - \mathbf{x}^k(t)\| &= \left\| \int_0^t [\mathbf{X}(\mathbf{x}^k(s), s) - \mathbf{X}(\mathbf{x}^{k-1}(s), s)] ds \right\| \\ &\leq \int_0^t \|\mathbf{X}(\mathbf{x}^k(s), s) - \mathbf{X}(\mathbf{x}^{k-1}(s), s)\| ds \\ &\leq L \int_0^t \|\mathbf{x}^k(s) - \mathbf{x}^{k-1}(s)\| ds \\ &\leq L \int_0^t \frac{(M/L)(Ls)^k}{k!} ds = \frac{(M/L)(Lt)^{k+1}}{(k+1)!}. \end{aligned}$$

Portanto, a desigualdade (B.3.8) vale.

Agora, mostramos que a sequência $\{\mathbf{x}^n(t)\}$ converge uniformemente para $0 \leq t \leq T$. Temos, para este intervalo

$$\frac{(M/L)(Lt)^k}{k!} \leq \frac{(M/L)(LT)^k}{k!},$$

e a série positiva

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(M/L)(LT)^k}{k!}$$

converge para $(M/L)(e^{LT} - 1)$. Então, pelo Teorema do Confronto, a série

$$\mathbf{x}^0(t) + \sum_{k=1}^{\infty} [\mathbf{x}^k(t) - \mathbf{x}^{k-1}(t)]$$

também é convergente.

De fato, a convergência é uniforme para $0 \leq t \leq T$, uma vez que $\frac{(M/L)(LT)^k}{k!}$ é independente de t . A n -ésima soma parcial representa a n -ésima iteração de Picard,

$$\mathbf{x}^0(t) + \sum_{k=1}^n [\mathbf{x}^k(t) - \mathbf{x}^{k-1}(t)] = \mathbf{x}^n(t). \quad (\text{B.3.10})$$

Logo, a sequência de funções $\{\mathbf{x}^n(t)\}$ converge uniformemente. □

Com ajuda deste lema, temos condição de enunciar o seguinte teorema,

TEOREMA B.3.4 (Teorema da existência) *Assuma que $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$ seja contínuo e satisfaça uma condição de Lipschitz com constante L no intervalo $|t - a| \leq T$ para todo \mathbf{x}, \mathbf{y} . Então, o problema de valor inicial (B.3.1) tem solução única no intervalo $|t - a| \leq T$.*

◇ **Demonstração:** A unicidade é consequência direta do **Teorema da unicidade** B.2.1. Precisamos provar apenas a existência de solução.

Pelo lema B.3.3, a sequência $\{\mathbf{x}^n(t)\}$ definida pela iteração de Picard com $\mathbf{x}^0(t) = \mathbf{c}$ é uniformemente convergente. Denotamos por $\mathbf{x}^\infty(t)$ a função limite. Mostraremos que $\mathbf{x}^\infty(t)$ é uma solução da equação integral (B.3.2).

Pela definição,

$$\mathbf{x}^{n+1}(t) = \mathbf{c} + \int_0^t \mathbf{X}(\mathbf{x}^n(s), s) ds. \quad (\text{B.3.11})$$

O lado esquerdo desta igualdade é uniformemente convergente a $\mathbf{x}^\infty(t)$. Pela condição de Lipschitz,

$$\|\mathbf{X}(\mathbf{x}^m(s), s) - \mathbf{X}(\mathbf{x}^n(s), s)\| \leq L\|\mathbf{x}^m(s) - \mathbf{x}^n(s)\|, \quad (\text{B.3.12})$$

e, portanto, o lado direito também é uniformemente convergente. Como $\mathbf{X}(\mathbf{x}, s)$ é contínuo, sabemos que

$$\mathbf{X}(\mathbf{x}^n(s), s) \longrightarrow \mathbf{X}(\mathbf{x}^\infty(s), s). \quad (\text{B.3.13})$$

Portanto, obtemos

$$\mathbf{x}^\infty(t) = \mathbf{c} + \int_0^t \mathbf{X}(\mathbf{x}^\infty(s), s) ds. \quad (\text{B.3.14})$$

Finalmente, pelo teorema B.3.1, concluímos que a função $\mathbf{x}^\infty(t)$ é uma solução do problema de valor inicial (B.3.1). \square

► **Exemplo:** Resolva o problema de valor inicial

$$\frac{dx}{dt} = x, \quad x(0) = 1 \quad (\text{B.3.15})$$

usando o método de iteração de Picard.

Solução: Para este problema, o operador U é definido por

$$U(x(t)) = 1 + \int_0^t x(s) ds. \quad (\text{B.3.16})$$

Logo, as iterações de Picard fornecem

$$\begin{aligned} x^0(t) &= 1, \\ x^1(t) &= U(x^0(t)) = 1 + \int_0^t 1 ds = 1 + t, \\ x^2(t) &= U(x^1(t)) = 1 + \int_0^t (1 + s) ds \\ &= 1 + t + \frac{t^2}{2}, \\ &\vdots \\ x^n(t) &= 1 + t + \frac{t^2}{2} + \dots + \frac{t^n}{n!}, \\ x^{n+1}(t) &= U(x^n(t)) \\ &= 1 + \int_0^t \left(1 + s + \frac{s^2}{2} + \dots + \frac{s^n}{n!} \right) ds \\ &= 1 + t + \frac{t^2}{2} + \dots + \frac{t^n}{n!} + \frac{t^{n+1}}{(n+1)!}. \end{aligned} \quad (\text{B.3.17})$$

Vemos, então, que a sequência $\{x^{(n)}(t)\}$ converge uniformemente à função e^t . Portanto, temos a solução $x(t) = e^t$ pelo método de Picard. \square

B.4 Observações

Neste apêndice revisamos o procedimento básico para determinação de existência e unicidade de soluções de um conjunto de equações diferenciais. Ao longo desta tese, este procedimento foi adaptado a problemas mais complexos nos quais o conjunto de equações diferenciais foi substituído por equações de fluxo no espaço de medidas (Capítulo 2) ou por equações diferenciais estocásticas (Capítulo 3).

Para esses casos mais complexos, o procedimento é essencialmente o mesmo. A dificuldade, deixada implícita neste apêndice, se encontra em definir uma *distância* apropriada entre soluções. Aqui, a distância é dada, simplesmente pela norma da diferença vetorial entre soluções (ver (B.2.4)). No caso do Capítulo 2, a distância deve ser dada entre funções solução do problema de fluxo. Ou seja, a distância deve ter status de funcional e deve se adequar à geometria do espaço analisado. Nestes casos, temos distâncias com definições intrincadas como (2.3.82), porém o método permanece o mesmo.

No problema estocástico do Capítulo 3, a distância deve ser dada entre processos. Felizmente, a análise estatística (Ver Apêndice C) fornece a distância apropriada em termo da expectativa da diferença entre os processos solução (3.2.21).

O procedimento para a escolha de uma distância apropriada se baseia na análise das características do sistema e no conhecimento das entidades envolvidas (funções, processos, vetores, ...). Porém, formalmente, devemos escolher uma distância $d(x, y)$ entre as entidades x e y de um espaço M que satisfaça três condições básicas

- $d(x, y) \geq 0$, $\forall x, y$ e $d(x, y) = 0$ se, e somente se, $x = y$;
- $d(x, y) = d(y, x)$, ou seja, a distância é simétrica;
- A distância deve satisfazer uma desigualdade triangular: $d(x, z) \leq d(x, y) + d(y, z)$.

Uma distância satisfazendo estes três critérios é chamada de métrica e, junto ao espaço M , forma o *espaço métrico* do sistema.

APÊNDICE C – Equações diferenciais estocásticas

Neste apêndice vamos revisar as ferramentas básicas para lidar com equações diferenciais envolvendo termos estocásticos. Tais equações aparecem naturalmente quando permitimos alguma aleatoriedade em um coeficiente de uma equação diferencial. Fisicamente, estas situações existem quando o sistema apresenta muitos graus de liberdade acoplados e estamos interessados em analisar apenas um número pequeno destes, por exemplo. Equações diferenciais estocásticas aparecem, também, em problemas de modelagem dinâmica tais como problemas de crescimento populacional, matemática financeira ou comportamento coletivo, onde os elementos do sistema possuem um caráter intrinsecamente não determinístico.

C.1 Definições matemáticas e estatísticas preliminares

Usamos teoria de probabilidade quando não há como conhecer o valor preciso de alguma variável, mas temos acesso à probabilidade relativa dessa assumir um entre muitos valores prováveis. Chamamos, genericamente, esta variável de X e dizemos que X é uma *variável aleatória*. Por exemplo, se X for o valor que obtemos ao jogar um dado de 6 lados, a probabilidade de obter $X = 2$, identificada por $P(X = 2)$ é igual a $1/6$. Além disso, o conjunto de todos os valores prováveis para X será denominado de *espaço amostral*. Usaremos o símbolo Ω para nos referir a um espaço amostral (no exemplo, $\Omega = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$). O resultado de um lançamento do dado (uma medida, ou realização, do sistema) será representado por $X(\omega)$, onde ω é um elemento de Ω chamado de *amostra*.

Neste exemplo simples, X é uma variável aleatória discreta. Entretanto, podemos facilmente estender o conceito de variável aleatória e de probabilidade para valores contínuos. Se X for uma variável aleatória contínua, a probabilidade de X assumir um valor x é dada por uma função contínua chamada de *densidade de probabilidade* e denotada por $P(x)$. Deste modo, a

probabilidade do valor de X estar no intervalo $[a, b]$ é

$$\text{Prob}(a < x < b) = \int_a^b P(x) dx. \quad (\text{C.1.1})$$

Por construção, a integral de $P(x)$ em todo o espaço deve ser igual a 1, uma vez que X deve assumir um desses valores

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x) dx = 1. \quad (\text{C.1.2})$$

O valor esperado, ou *expectativa*, de X também é obtido por meio de $P(x)$ e definido por

$$\mathbb{E}[X] = \int_{-\infty}^{\infty} x P(x) dx. \quad (\text{C.1.3})$$

Diretamente, vemos que, se $P(x)$ for simétrico em torno de qualquer valor $x = a$, $\mathbb{E}[X] = a$.

A *variância* (ou dispersão) de X é definida como

$$V[X] = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mathbb{E}[X])^2 P(x) dx = \mathbb{E}[X^2] - (\mathbb{E}[X])^2, \quad (\text{C.1.4})$$

e a raiz quadrada desta, como seu *desvio padrão*. Este nos dá uma medida de quão larga é a densidade de probabilidade para X , ou seja, quanto podemos esperar que X desvie de seu valor esperado.

Em sistemas físicos microscópicos, por exemplo, lidamos com uma quantidade muito grande de partículas interagindo. O ruído nesses sistemas resulta, então, da soma de vários eventos aleatórios acontecendo no nível microscópico, sejam eles colisões entre partículas, oscilações em campos elétricos devidas ao movimento aleatório de partículas carregadas, vibrações térmicas de átomos em uma rede, etc.. A força resultante em uma partícula de tal sistema será dada por uma soma de muitas variáveis aleatórias, logo, podemos usar um resultado conhecido como *teorema do limite central* [37, 43] para caracterizar a densidade de probabilidade dessa força.

O *teorema do limite central* nos garante que, ao somarmos muitas variáveis aleatórias independentes, a densidade de probabilidade da soma se aproxima de uma distribuição *Gaussiana*. O limite é exato quando o número de termos na soma tende ao infinito. Por este motivo, ruídos Gaussianos terão destaque neste capítulo.

A densidade de probabilidade Gaussiana é dada por

$$P_G(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}. \quad (\text{C.1.5})$$

A expectativa desta distribuição é $\mathbb{E}[X] = \mu$ e a variância é dada por $V[X] = \sigma^2$. A figura C.1 ilustra a forma desta distribuição.

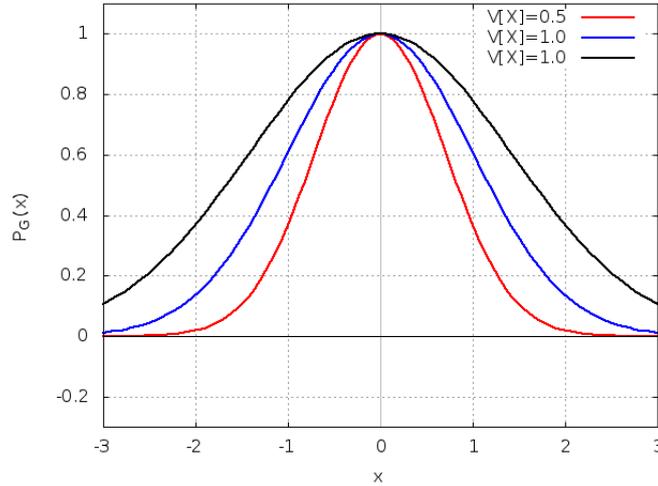


Figura C.1: Distribuição Gaussiana para diversos valores da variância $V[X]$.

C.2 Equações diferenciais estocásticas

Usualmente, em sistemas físicos reais, variáveis aleatórias aparecem como *ruídos* que modificam alguma variável determinística do sistema. Essas variações acontecem idealmente de maneira dinâmica e, portanto, dependem do tempo. A qualquer coleção parametrizada de variáveis aleatórias $\{X\}_{t \in \mathcal{T}}$, chamaremos *processo estocástico*. Ruídos em sistemas físicos são exemplos de processos estocásticos parametrizados pelo tempo.

O espaço de parâmetros \mathcal{T} é, comumente, a meia linha $[0, \infty)$ representando o tempo no sistema. Note que, para cada $t \in \mathcal{T}$, teremos uma variável aleatória

$$\omega \longrightarrow X_t(\omega); \quad \omega \in \Omega. \quad (\text{C.2.1})$$

Por outro lado, fixando a amostra $\omega \in \Omega$ podemos considerar a função

$$t \longrightarrow X_t(\omega); \quad t \in \mathcal{T} \quad (\text{C.2.2})$$

que é chamada de *caminho* de X_t .

Intuitivamente, se pensarmos no parâmetro t como o tempo, podemos identificar cada ω com uma partícula de um sistema hipotético. Nesta interpretação, $X_t(\omega)$ representaria a posição da partícula ω no tempo t . Em algumas situações, será conveniente escrevermos $X(t, \omega)$ no

lugar de $X_t(\omega)$. Ou seja, podemos tomar o processo como uma função de duas variáveis

$$(t, \omega) \longrightarrow X(t, \omega) \quad (\text{C.2.3})$$

do espaço $\mathcal{T} \times \Omega$ em \mathbb{R} .

Genericamente, considere um sistema físico caracterizado por uma variável dinâmica X_t no tempo t . A evolução temporal dessa será dada por uma função determinística conhecida $b(t, X_t)$ somada a uma parte estocástica (ruído) proveniente de algum caráter probabilístico do sistema. Podemos escrever esta evolução na forma

$$\frac{dX_t}{dt} = b(t, X_t) + \sigma(t, X_t) \cdot \text{“ruído”}, \quad (\text{C.2.4})$$

onde introduzimos a amplitude $\sigma(t, X_t)$ do ruído por generalidade. Estamos interessados em descrever o ruído por meio de algum processo estocástico W_t , portanto reescrevemos

$$\frac{dX_t}{dt} = b(t, X_t) + \sigma(t, X_t)W_t. \quad (\text{C.2.5})$$

Baseados nas características gerais de sistemas com muitos graus de liberdade (ou em sistemas complexos, como descrito na introdução deste capítulo), assumimos que o processo W_t satisfaz às seguintes propriedades:

- i) $t_1 \neq t_2 \implies W_{t_1}$ e W_{t_2} são independentes;
- ii) $\{W_t\}$ é estacionário, ou seja, a distribuição de $\{W_{t_1+t}, \dots, W_{t_k+t}\}$ não depende de t ;
- iii) $\mathbb{E}[W_t] = 0$ para todo tempo t .

Conhecendo estas propriedades, vamos tentar reescrever a equação (C.2.5) de forma a substituir W_t por um processo estocástico apropriado. Para tal, definimos $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_m = t$ para considerar uma versão discretizada na forma

$$X_{k+1} - X_k = b(t_k, X_k) \Delta t_k + \sigma(t_k, X_k)W_k \Delta t_k, \quad (\text{C.2.6})$$

onde

$$X_k = X(t_k), \quad W_k = W_{t_k}, \quad \Delta t_k = t_{k+1} - t_k. \quad (\text{C.2.7})$$

Agora, por simplicidade, abandonamos a notação W_t e substituímos $W_k \Delta t_k$ por uma única quantidade $\Delta V_k = V_{t_{k+1}} - V_{t_k}$, onde $\{V_t\}_{t \geq 0}$ é o processo estocástico que procuramos caracterizar. As propriedades i), ii) e iii) sugerem que V_t deva ter *incrementos estacionários independentes*

com média zero. O único processo que satisfaz a estas condições é o movimento Browniano B_t [37].

Definimos movimento Browniano padrão B_t , com $t \geq 0$, como um processo Gaussiano contínuo com incrementos independentes tal que

$$B_0 = 0, \quad \mathbb{E}[B_t] = 0, \quad V[B_t - B_s] = t - s \quad (\text{C.2.8})$$

para todo $0 \leq s \leq t$. Por esta definição, $B_t - B_s$ tem distribuição Gaussiana com média 0 e variância $(t - s)$ e os incrementos $B_{t_2} - B_{t_1}$ e $B_{t_4} - B_{t_3}$ são independentes para todo $0 \leq t_1 < t_2 \leq t_3 < t_4$. A representação matemática do movimento Browniano é, usualmente, denominada *processo de Wiener*. A figura C.2 mostra cinco exemplos de tais processos.

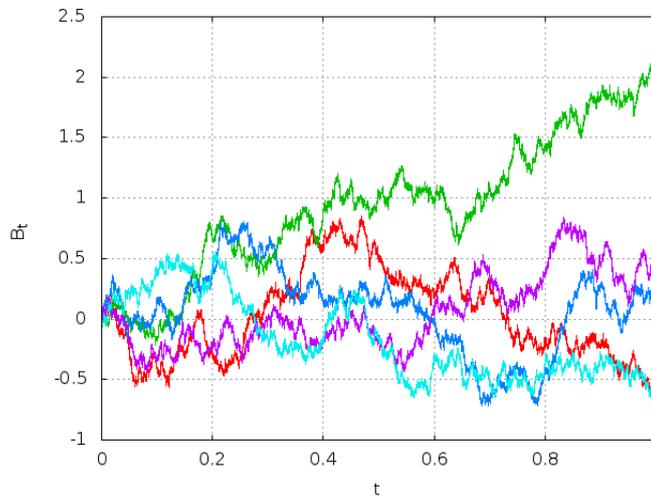


Figura C.2: Exemplo de vários movimentos Brownianos padrão (processo de Wiener).

Portanto, substituímos $V_t = B_t$ e obtemos, de (C.2.6),

$$X_k = X_0 + \sum_{j=0}^{k-1} b(t_j, X_j) \Delta t_j + \sum_{j=0}^{k-1} \sigma(t_j, X_j) \Delta B_j. \quad (\text{C.2.9})$$

O que devemos responder, agora, é se o limite do lado direito de (C.2.9) existe quando $\Delta t_j \rightarrow 0$. Caso exista, usando a notação usual, deveríamos obter

$$X_t = X_0 + \int_0^t b(s, X_s) ds + \text{“} \int_0^t \sigma(s, X_s) dB_s \text{”} \quad (\text{C.2.10})$$

e adotariamos a convenção de que a equação (C.2.5) nos dá a informação de que X_t é um processo estocástico que satisfaz (C.2.10).

Precisamos, então, provar a existência (ao menos aproximada) de

$$\text{“} \int_0^t f(s, \omega) dB_s(\omega) \text{”}, \quad (\text{C.2.11})$$

onde $B_t(\omega)$ é um movimento Browniano unidimensional padrão e ω é um elemento do espaço amostral Ω . Vamos supor que $0 \leq S < T$ e que $f(t, \omega) : [0, \infty) \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ seja dada.

Vamos assumir, como primeira tentativa, que a função f possa ser escrita na forma

$$f(t, \omega) := \phi(t, \omega) = \sum_{j \geq 0} e_j(\omega) \cdot \chi_{[j, (j+1))}(t), \quad (\text{C.2.12})$$

onde χ representa a função característica (ou indicadora)¹ e $e_j(\omega)$ é alguma função da variável aleatória a ser determinada. Para tais funções, é razoável definir

$$\int_S^T \phi(t, \omega) dB_t(\omega) = \sum_{j \geq 0} e_j(\omega) [B_{t_{j+1}} - B_{t_j}](\omega), \quad (\text{C.2.13})$$

onde

$$t_n = \begin{cases} n & \text{se } S \leq n \leq T, \\ S & \text{se } n < S, \\ T & \text{se } n > T. \end{cases}$$

Entretanto, se não assumirmos um valor para as funções $e_j(\omega)$ teremos dificuldades no cálculo das integrais (C.2.11).

• **Exemplo:** Sejam as funções

$$\begin{aligned} \phi_1(t, \omega) &= \sum_{j \geq 0} B_j(\omega) \cdot \chi_{[j, (j+1))}(t) \\ \phi_2(t, \omega) &= \sum_{j \geq 0} B_{j+1}(\omega) \cdot \chi_{[j, (j+1))}(t). \end{aligned}$$

Logo,

$$\mathbb{E} \left[\int_0^T \phi_1(t, \omega) dB_t(\omega) \right] = \sum_{j \geq 0} \mathbb{E} [B_{t_j} (B_{t_{j+1}} - B_{t_j})] = 0, \quad (\text{C.2.14})$$

¹Função característica (ou indicadora) $\chi_A(x)$ de um subconjunto A do conjunto X é definida para valores $x \in X$ como

$$\chi_A(x) = \begin{cases} 1, & \text{se } x \in A, \\ 0, & \text{se } x \notin A. \end{cases}$$

uma vez que $\{B_t\}$ tem incrementos independentes. Por outro lado,

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[\int_0^T \phi_2(t, \omega) dB_t(\omega) \right] &= \sum_{j \geq 0} \mathbb{E} [B_{t_{j+1}}(B_{t_{j+1}} - B_{t_j})] \\ &= \sum_{j \geq 0} (\mathbb{E} [B_{t_{j+1}}(B_{t_{j+1}} - B_{t_j})] - \mathbb{E} [B_{t_j}(B_{t_{j+1}} - B_{t_j})]) \\ &= \sum_{j \geq 0} \mathbb{E} [(B_{t_{j+1}} - B_{t_j})^2] = T, \end{aligned}$$

onde usamos a propriedade (C.2.8).

Vemos, então, que embora ϕ_1 e ϕ_2 pareçam ser boas aproximações para

$$f(t, \omega) = B_t(\omega),$$

suas integrais, de acordo com (C.2.13), diferem muito.

Esse exemplo simples reflete o fato de que as variações nas trajetórias de B_t são grandes demais para definir a integral (C.2.11) no sentido usual de Riemann. De fato, mostra-se [37, 43] que as trajetórias $t \rightarrow B_t$ são não-diferenciáveis em todos os pontos.

Em geral, tentaremos aproximar uma dada função $f(t, \omega)$ por

$$\sum_j f(t_j^*, \omega) \cdot \chi_{(t_j, t_{j+1})}(t),$$

onde os pontos t_j^* pertencem ao intervalo $[t_j, t_{j+1}]$, e definiremos a integral (C.2.11) como o limite de $\sum_j f(t_j^*, \omega)[B_{t_{j+1}} - B_{t_j}](\omega)$ quando $n \rightarrow \infty$, onde n é o número de termos na soma em j . Entretanto, como vimos no exemplo acima, a escolha dos pontos t_j^* altera o resultado da integral. Duas escolhas se mostraram apropriadas para lidar com sistemas estocásticos:

1. $t_j^* = t_j$ (ponto da esquerda), que dá origem à chamada *integral de Itô* [37, 43], de aqui em diante denotada por

$$\int_0^T f(t, \omega) dB_t(\omega) \quad (\text{C.2.15})$$

e

2. $t_j^* = (t_j + t_{j+1})/2$ (ponto médio), que dá origem à integral de Stratonovich [37, 43], denotada por

$$\int_0^T f(t, \omega) \circ dB_t(\omega). \quad (\text{C.2.16})$$

C.3 Integral de Itô

Neste trabalho, vamos focar na primeira escolha, ou seja, na integral de Itô. O método aproximativo apresentado acima nos fornece resultados corretos caso cada função $\omega \rightarrow f(t, \omega)$ dependa **apenas** do comportamento de $B_s(\omega)$ até o tempo t . Com esta observação, apresentamos, a seguir, as principais propriedades das integrais de Itô.

► **Isometria de Itô:** Dizemos que uma função é elementar se ela pode ser escrita na forma da equação (C.2.12). Se uma função $\phi(t, \omega)$ é limitada e elementar, então

$$\mathbb{E} \left[\left(\int_0^T \phi(t, \omega) dB_t(\omega) \right)^2 \right] = \mathbb{E} \left[\int_0^T \phi^2(t, \omega) dt \right]. \quad (\text{C.3.1})$$

Demonstração. Seja $\Delta B_j = B_{t_{j+1}} - B_{t_j}$. Então, usando a independência dos incrementos de B_t ,

$$\mathbb{E}[e_i e_j \Delta B_i \Delta B_j] = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ \mathbb{E}[e_j^2] \cdot (t_{j+1} - t_j), & i = j. \end{cases} \quad (\text{C.3.2})$$

para $i < j$. Logo,

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[\left(\int_0^T \phi(t, \omega) dB_t(\omega) \right)^2 \right] &= \sum_{i,j} \mathbb{E}[e_i e_j \Delta B_i \Delta B_j] = \sum_j \mathbb{E}[e_j^2] \cdot (t_{j+1} - t_j) \\ &= \mathbb{E} \left[\int_0^T \phi^2(t, \omega) dt \right]. \end{aligned}$$

□

A igualdade (C.3.1) é conhecida como *isometria de Itô* e é fundamental no cálculo de integrais estocásticas, uma vez que associa a expectativa de uma integral de Itô com aquela de uma integral determinística.

Podemos estender os resultados obtidos para qualquer função $f \in \mathcal{V}$, onde \mathcal{V} é o espaço das funções $f(t, \omega) : [0, \infty) \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

► **Integral de Itô:** Seja $f \in \mathcal{V}$. Então, a integral de f de S a T é definida por

$$\int_S^T f(t, \omega) dB_t(\omega) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_S^T \phi_n(t, \omega) dB_t(\omega), \quad (\text{C.3.3})$$

onde ϕ_n é uma função elementar com n termos tal que

$$\mathbb{E} \left[\int_S^T (f(t, \omega) - \phi_n(t, \omega))^2 dt \right] \rightarrow 0 \quad \text{quando } n \rightarrow \infty. \quad (\text{C.3.4})$$

▷ Usando a equação (C.3.3), podemos estender a propriedade de isometria (C.3.1) na forma

$$\mathbb{E} \left[\left(\int_S^T f(t, \omega) dB_t \right)^2 \right] = \mathbb{E} \left[\int_S^T f^2(t, \omega) dt \right] \quad \text{para toda } f \in \mathcal{V}. \quad (\text{C.3.5})$$

Apresentamos, agora, um exemplo para ilustrar a metodologia do cálculo de Itô:

• **Exemplo:**

Assumindo $B_0 = 0$,

$$\int_0^t B_s dB_s = \frac{1}{2} B_t^2 - \frac{1}{2} t. \quad (\text{C.3.6})$$

Mostramos esse resultado partindo da escolha de uma função elementar apropriada,

$$\phi_n(s, \omega) = \sum B_j(\omega) \cdot \chi_{[t_j, t_{j+1})}(s), \quad (\text{C.3.7})$$

onde $B_j = B_{t_j}$. Logo, usando (C.3.3),

$$\int_0^t B_s dB_s = \lim_{\Delta t_j \rightarrow 0} \int_0^t \phi_n dB_s = \lim_{\Delta t_j \rightarrow 0} \sum_j B_j \Delta B_j, \quad (\text{C.3.8})$$

onde $\Delta t_j = (t_{j+1} - t_j)$. Agora, considere

$$\begin{aligned} \Delta(B_j^2) &= B_{j+1}^2 - B_j^2 = (B_{j+1} - B_j)^2 + 2B_j(B_{j+1} - B_j) \\ &= (\Delta B_j)^2 + 2B_j \Delta B_j, \end{aligned}$$

que permite escrever

$$B_t^2 = \sum_j \Delta(B_j^2) = \sum_j (\Delta B_j)^2 + 2 \sum_j B_j \Delta B_j. \quad (\text{C.3.9})$$

ou

$$\sum_j B_j \Delta B_j = \frac{1}{2} B_t^2 - \frac{1}{2} \sum_j (\Delta B_j)^2. \quad (\text{C.3.10})$$

Pela propriedade de variância do movimento Browniano dada em (C.2.8), podemos ver que $\sum_j (\Delta B_j)^2 \rightarrow t$ com $\Delta t_j \rightarrow 0$. Logo, o resultado em (C.3.6) segue. \square

Veja que o termo $-\frac{1}{2}t$ indica que as integrais de Itô não se comportam como integrais usuais (no sentido de Riemann). Escrevemos abaixo as principais propriedades da integral de Itô:

Sejam $f, g \in \mathcal{V}$ e $0 \leq S < U < T$. Então

$$(i) \int_S^T f dB_t = \int_S^U f dB_t + \int_U^T f dB_t;$$

(ii) Seja c uma constante. Logo $\int_S^T (cf + g)dB_t = c \int_S^T f dB_t + \int_S^T g dB_t$;

(iii) $\mathbb{E} \left[\int_S^T f dB_t \right] = 0$.

Uma outra importante característica das integrais de Itô, conhecida como **fórmula de Itô**, segue do fato de podermos associar à integral de Itô um processo estocástico (de Itô) X_t na forma

$$X_t = X_0 + \int_0^t u(s, \omega) ds + \int_0^t v(s, \omega) dB_s, \quad (\text{C.3.11})$$

onde u e v são funções definidas no espaço de Hilbert no tempo. Alternativamente, podemos escrever o processo de Itô como solução da equação

$$dX_t = u dt + v dB_t. \quad (\text{C.3.12})$$

A fórmula de Itô, então, é uma forma tentativa de encontrar soluções para (C.3.12). Segue seu enunciado:

Seja $g(t, x) \in C^2([0, \infty) \times \mathbb{R})$, ou seja, duas vezes diferenciável em $[0, \infty) \times \mathbb{R}$. Então,

$$Y_t = g(t, X_t) \quad (\text{C.3.13})$$

é um processo de Itô e

$$dY_t = \frac{\partial g}{\partial t}(t, X_t) dt + \frac{\partial g}{\partial x}(t, X_t) dX_t + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 g}{\partial x^2}(t, X_t) (dX_t)^2, \quad (\text{C.3.14})$$

onde $(dX_t)^2 = (dX_t) \cdot (dX_t)$ é calculado obedecendo as regras

$$dt \cdot dt = dt \cdot dB_t = dB_t \cdot dt, \quad dB_t \cdot dB_t = dt. \quad (\text{C.3.15})$$

Para entender como utilizar esta fórmula, voltemos ao exemplo dado pela relação (C.3.7). Seja a integral

$$I = \int_0^t B_s dB_s. \quad (\text{C.3.16})$$

Escolhemos o processo de Itô $X_t = B_t$ e $g(t, x) = \frac{1}{2}x^2$. Portanto,

$$Y_t = g(t, B_t) = \frac{1}{2}B_t^2. \quad (\text{C.3.17})$$

Usando a fórmula de Itô (C.3.14),

$$dY_t = \frac{\partial g}{\partial t} dt + \frac{\partial g}{\partial x} dB_t + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} (dB_t)^2 = B_t dB_t + \frac{1}{2} (dB_t)^2 = B_t dB_t + \frac{1}{2} dt$$

Ou seja,

$$d\left(\frac{1}{2}B_t^2\right) = B_t dB_t + \frac{1}{2} dt. \quad (\text{C.3.18})$$

Que pode ser escrito em forma integral

$$\frac{1}{2}B_t^2 = \int_0^t B_t dB_t + \frac{1}{2}t, \quad (\text{C.3.19})$$

de acordo com (C.3.7).

Todas as propriedades mostradas neste capítulo estão em uma dimensão por simplicidade e clareza. Porém, a integral de Itô, assim como a fórmula de Itô, são diretamente generalizadas para qualquer número de dimensões.

APÊNDICE D – Limite de Ornstein-Uhlenbeck para o processo de velocidade de um sistema de N -corpos interagindo estocasticamente

D.1 Introdução

A média de *ensemble* da evolução estocástica de uma partícula teste browniana imersa em um banho térmico de temperatura constante θ é dada pela equação de Fokker-Planck com coeficientes de difusão e fricção linear dados [38]. A solução a esta equação é bem conhecida e fornece a evolução da função de densidade de probabilidade do ensemble no espaço das velocidades.

Kiessling and Lancellotti [56] mostram que, se os coeficientes desta equação diferencial parcial para o processo de Ornstein-Uhlenbeck são escolhidos como sendo constantes funcionais da própria função solução, a equação pode ser reinterpretada para descrever a evolução cinética de um sistema de N -corpos isolado com interações estocásticas conservando massa total, energia e momento ¹. Em seu trabalho, os autores consideram um ensemble infinito de vetores aleatórios de velocidade de N partículas independentes e identicamente distribuídos (i.i.d.) $\{\mathbf{V}_\alpha\}_{\alpha=1}^\infty$, cada um representando um possível microestado do sistema no espaço das velocidades (em \mathbb{R}^{3N}), enquanto as posições das partículas são consideradas como estando uniformemente distribuídas em uma caixa periódica. Por meio de uma transformação nos \mathbf{V}_α 's, os autores mostram que a análise deste sistema de N -corpos com conservação de energia e momento pode ser feita em termos de um sistema de N' -corpos com apenas conservação de energia e $N' = N - 1$.

Nosso objetivo neste estudo é analisar a evolução do mesmo sistema de partículas com interações estocásticas movido por um termo de ruído Browniano, porém de uma perspectiva

¹Carlen e Gangbo [51] estudam uma equação cinética similar, mas utilizam técnicas diferentes.

de muitos-corpos, i.e. olhamos uma única realização do sistema e estudamos a evolução de sua trajetória. De acordo com os argumentos de [56], é suficiente estudar o sistema com apenas o vínculo de conservação de energia, e assim o fazemos. Portanto não usamos a *linha* na notação N' e nos referimos a um sistema de N partículas, considerando as “velocidades” deste modelo efetivo como se fossem relacionadas a partículas reais (no espírito do modelo histórico de Kac [54]). Este modelo é, também, relacionado à classe de sistemas de Kac na terminologia de [52] (ver [60]).

Em um ambiente tridimensional, conservação da energia total limita o sistema, no espaço das velocidades, a uma esfera $(D - 1)$ -dimensional com raio definido pela energia inicial (com $D = 3N$ sendo o número de graus de liberdade do sistema). Portanto, a evolução do sistema no espaço das velocidades pode ser modelado por um movimento Browniano nessa esfera. Logo, nos baseamos nos trabalhos de Stroock [40] e de Brillinger [41], em que a evolução aleatória de uma única partícula em uma esfera é modelada com integrais estocásticas, para escrever as equações diferenciais apropriadas para a evolução do vetor D -dimensional \mathbf{V} de todas as componentes das velocidades das N partículas. Destacando uma componente de \mathbf{V} (denominada V_1), mostramos que esta converge, no limite de $D \rightarrow \infty$, a um processo de Ornstein-Uhlenbeck [38], que é comumente utilizado para descrever a evolução de uma única partícula sob ação de um “ruído branco” e fricção.

D.2 Resumo e estratégia

Estamos interessados na difusão de um sistema tridimensional de N partículas com conservação de energia total. Este vínculo confina a evolução do sistema, no espaço das velocidades, a uma esfera $(3N - 1)$ -dimensional com raio definido pela energia inicial. A dinâmica do sistema é regida por uma única equação diferencial estocástica para um vetor $(D = 3N)$ -dimensional de velocidades (\mathbf{V}) sob ação de um termo D -dimensional de ruído Browniano introduzido na Seção D.3.

Um análise rápida dessa equação de evolução mostra que uma única componente de \mathbf{V} evolui independentemente das demais *direções* de acordo com um processo de Ornstein-Uhlenbeck sujeito a um termo de ruído na mesma direção, quando a componente é pequena o suficiente. Nosso foco, entretanto, é estudar o processo limite para as componentes de \mathbf{V} quando estas são de ordem um. Formalmente, definimos um processo unidimensional de Ornstein-Uhlenbeck de referência, e mostramos que a evolução de uma componente de \mathbf{V} converge (em probabilidade) a esse processo de referência quando $D \rightarrow \infty$. Este processo é enunciado na Seção D.4 e

demonstrado na Seção D.5.

A demonstração é facilmente estendida para qualquer processo d -dimensional finito ($d < D$) construído a partir de d componentes da difusão original. Assim, mostramos que estes processos são independentes e identicamente distribuídos (i.i.d.) no limite $D \rightarrow \infty$, provando a propagação da independência inicial das d “partículas” ou seja, a propagação do caos molecular ou a “propriedade de Boltzmann” ([54, 55], veja a revisão feita por Mischler e Mouhot [57] para uma discussão extensa no assunto), na Seção D.7.

O sistema com conservação da energia e do momento totais é considerado na Seção D.8. Modelamos esta dinâmica com uma equação diferencial estocástica para os vetores $3N$ -dimensionais das velocidades sujeitos a um termo $3N$ -dimensional de ruído Browniano. Aqui, usamos o sistema original de N partículas (antes de eliminar a linha) e mostramos que os processos de velocidade de qualquer número m finito de partículas, no limite de $N \rightarrow \infty$, convergem a m processos independentes tridimensionais de Ornstein-Uhlenbeck.

D.3 Difusão em uma esfera

Considere um sistema de N partículas. A variação de momento das partículas se dá por alguma interação entre elas, dado que a energia total é conservada.

Seja $D = 3N$ o número de graus de liberdade do sistema. O estado do sistema é descrito pelo vetor D -dimensional

$$\mathbf{V} = (V_1, V_2, \dots, V_D), \quad (\text{D.3.1})$$

onde os V_i 's são todas as $D = 3N$ componentes dos vetores tridimensionais $\vec{V}_k = (V_{3k-2}, V_{3k-1}, V_{3k})$ representando a velocidade da k -ésima partícula em \mathbb{R}^3 . A conservação da energia vincula o vetor \mathbf{V} a assumir valores na variedade $(3N - 1)$ -dimensional de energia total Ne_0

$$\mathbb{M}_{e_0}^{3N-1} = \left\{ (\vec{V}_1, \dots, \vec{V}_N) : \sum_{i=1}^{3N} \frac{|V_i|^2}{2} = Ne_0 \right\}, \quad (\text{D.3.2})$$

viz. a esfera $(3N - 1)$ -dimensional de raio $\sqrt{2Ne_0}$.

Partindo de uma condição inicial arbitrária, a evolução do vetor \mathbf{V} é modelada pelo movimento Browniano na esfera, dado pela equação diferencial estocástica [41]

$$d\mathbf{V} = \lambda \sigma(\mathbf{V}) \cdot \odot d\mathbf{B}, \quad (\text{D.3.3})$$

onde λ é a amplitude do ruído,

$$\sigma_{ij}(\mathbf{V}) = \delta_{ij} - \frac{V_i V_j}{|\mathbf{V}|^2} \quad (\text{D.3.4})$$

é o projetor ortogonal no hiperplano ortogonal à \mathbf{V} ,

$$\mathbf{B} = (B_1, B_2, \dots, B_D) \quad (\text{D.3.5})$$

é o movimento Browniano padrão em D dimensões, e \odot denota o uso do cálculo de Stratonovich [37]. Embora o ponto de vista de Stratonovich pareça mais fisicamente natural no sentido de gerar as mesmas regras de derivação do cálculo usual e ocorrer ao tomar limites de equações diferenciais ordinárias sujeitas a ruídos suave [42], vamos mudar de ponto de vista e preferir trabalhar na representação de Itô. Esta representação tem algumas vantagens para os nossos propósitos, por exemplo, sabe-se que integrais de Itô são *martingales* [37], o que é crucial para a análise estocástica e computação de expectativas. A desvantagem é que integrais de Itô não se transformam da maneira usual por mudança de variáveis, e.g. a regra da cadeia para diferenciais de Itô envolve termos de segunda ordem [37, 43].

Portanto, trabalhamos com o movimento Browniano esférico como solução da equação diferencial de Itô [40, 58]

$$d\mathbf{V} = \lambda \sigma(\mathbf{V}) \cdot d\mathbf{B} - \lambda^2 \frac{D-1}{2} b(\mathbf{V}) dt, \quad (\text{D.3.6})$$

onde

$$b(\mathbf{V}) = \frac{\mathbf{V}}{|\mathbf{V}|^2}. \quad (\text{D.3.7})$$

O processo (D.3.3) permanece na superfície da esfera, o primeiro termo (de Itô) do lado direito de (D.3.6) desloca a velocidade dentro do plano tangente à esfera, e o último termo em (D.3.6) pode ser interpretado como trazendo o processo de volta à esfera [41]. Definindo $\theta := 2e_0/3$, reescalamos o tempo para $t' = \lambda^2 t / \theta$, o processo de Wiener para $\mathbf{B}' = \lambda \theta^{-1/2} \mathbf{B}$ e a velocidade $\mathbf{V}' = \theta^{-1/2} \mathbf{V}$, então, não escrevendo as linhas nas variáveis, o sistema (D.3.6)-(D.3.7) se reduz a

$$d\mathbf{V} = \sigma(\mathbf{V}) \cdot d\mathbf{B} - \frac{D-1}{2D} \mathbf{V} dt. \quad (\text{D.3.8})$$

Nosso espaço de probabilidade é o espaço padrão de movimentos Brownianos contínuos D -dimensionais (ver e.g. sec. I.3 de [58]).

D.4 Convergência ao processo de Ornstein-Uhlenbeck

Escolhemos uma componente de \mathbf{V} para estudar sua evolução. Evidentemente, esta evolução terá uma contribuição de todas as outras direções (as $D - 1$ dimensões restantes), portanto definimos

$$\mathbf{U} = \mathbf{V} - V_1 \hat{e}_1, \quad (\text{D.4.1})$$

onde \hat{e}_i é o vetor unitário na direção da i -ésima dimensão. Reescrevendo (D.3.8), obtemos o sistema

$$dV_1 = \sigma_1(V_1)dB_1 - \frac{D-1}{2}b_1(V_1)dt - \mathbf{H}(\mathbf{U}, V_1) \cdot d\mathbf{B}_U, \quad (\text{D.4.2})$$

$$d\mathbf{U} = \sigma_U(\mathbf{U}) \cdot d\mathbf{B}_U - \frac{D-1}{2}\mathbf{b}_U(\mathbf{U})dt - \mathbf{H}(\mathbf{U}, V_1)d\mathbf{B}_1, \quad (\text{D.4.3})$$

dados

$$\begin{aligned} \sigma_1(V_1) &= 1 - \frac{V_1^2}{|\mathbf{V}|^2}, \quad b_1(V_1) = \frac{V_1}{|\mathbf{V}|^2}, \quad \mathbf{H}(\mathbf{U}, V_1) = \frac{V_1}{|\mathbf{V}|^2}\mathbf{U}, \\ (\sigma_U(\mathbf{U}))_{ij} &= \delta_{ij} - \frac{U_i U_j}{|\mathbf{V}|^2}, \quad \mathbf{b}_U(\mathbf{U}) = \frac{\mathbf{U}}{|\mathbf{V}|^2}, \quad \mathbf{B}_U = (B_2, \dots, B_D) \end{aligned} \quad (\text{D.4.4})$$

com o vínculo $|\mathbf{V}| = \sqrt{D}$.

Obtemos uma estimativa simples para a evolução de V_1 se analisarmos o limite de valores pequenos para V_1 ($V_1 \sim 0$). Neste limite,

$$\sigma_1(V_1) \sim 1, \quad \mathbf{H}(\mathbf{U}, V_1) \sim 0. \quad (\text{D.4.5})$$

Logo, a equação de evolução resultante seria

$$dV_1 \simeq dB_1 - \frac{D-1}{2|\mathbf{V}|^2}V_1 dt, \quad (\text{D.4.6})$$

que, no limite $D \rightarrow \infty$, gera

$$dV_1 \simeq dB_1 - \frac{V_1}{2} dt, \quad (\text{D.4.7})$$

que tem como solução o processo de Ornstein-Uhlenbeck padrão.

Vamos analisar, agora, a evolução geral de V_1 no limite $D \rightarrow \infty$, i.e. queremos conhecer o processo limite definido por (D.4.2) quando V_1 é de ordem um. Do resultado (D.4.7), esperamos que este processo seja, pelo menos, similar ao de Ornstein-Uhlenbeck. Nosso resultado principal é expresso no seguinte

Teorema D.4.1 *Seja V_1 uma componente de \mathbf{V} definida pela equação (D.3.8). Para $|\mathbf{V}| = \sqrt{D}$, o processo V_1 com valor inicial c_1 obedecendo (D.4.2) converge, no limite $D \rightarrow \infty$, ao processo*

de Ornstein-Uhlenbeck unidimensional com mesmo valor inicial e sujeito ao mesmo ruído B_1 , onde a convergência é no sentido quadrático médio em $C([0, T], \mathbb{R})$ para qualquer $T > 0$.

Dado que $c_1 \in \mathbb{R}$, o modelo de D finito faz sentido apenas para $D \geq c_1^2$.

D.5 Demonstração do teorema D.4.1

Começamos nossa análise definindo o processo unidimensional de Ornstein-Uhlenbeck de referência (ou alvo para o limite)

$$dV_1' = \alpha dB_1 - \beta V_1' dt, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{R}. \quad (\text{D.5.1})$$

sujeito ao mesmo ruído B_1 que a expressão (D.4.2). Com este, introduzimos

$$v = V_1 - V_1'. \quad (\text{D.5.2})$$

Calculamos a expectativa do quadrado deste novo processo para compreender a evolução de V_1 comparada à evolução do processo de referência. Logo, começamos por escrever explicitamente

$$v(t) = v_0 + \int_0^t \left[(\sigma_1(V_1) - \alpha) dB_1 - \left(\frac{D-1}{2} b_1(V_1) - \beta V_1' \right) dt - \mathbf{H}(\mathbf{U}, V_1) \cdot d\mathbf{B}_U \right], \quad (\text{D.5.3})$$

onde $v_0 = v(t=0)$.

Escolhemos os parâmetros $\alpha = 1$ e $\beta = 1/2$. Assim, temos a expectativa

$$\mathbb{E}[|v(t)|^2] = \mathbb{E} \left[\left(v_0 - \int_0^t \left(\frac{v(s)}{2} - \frac{V_1(s)}{2D} \right) ds - \int_0^t \frac{V_1^2}{D} dB_1 - \int_0^t \frac{V_1}{D} \mathbf{U} \cdot d\mathbf{B}_U \right)^2 \right], \quad (\text{D.5.4})$$

que é limitada por

$$\frac{\mathbb{E}[|v(t)|^2]}{3} \leq \mathbb{E}[|v_0|^2] + \mathbb{E} \left[\left(\int_0^t \left(\frac{v(s)}{2} - \frac{V_1(s)}{2D} \right) ds \right)^2 \right] + \mathbb{E} \left[\left(\int_0^t \frac{V_1}{D} \mathbf{V} \cdot d\mathbf{B} \right)^2 \right]. \quad (\text{D.5.5})$$

Usando a propriedade $d\langle B_i, B_j \rangle = \delta_{ij} dt$, onde $\langle \bullet, \bullet \rangle$ denota o processo de *variância cruzada* [37], e o fato de que $\mathbb{E} \left[\int_0^t f(s) dB_i(s) \right] = 0$, para qualquer função temporal f , o último termo no lado direito pode ser reescrito como

$$\sum_{i=1}^D \mathbb{E} \left[\left(\int_0^t \frac{V_1}{D} V_i dB_i \right)^2 \right] = \sum_{i=1}^D \mathbb{E} \left[\int_0^t \frac{V_1^2}{D^2} V_i^2 ds \right] = \mathbb{E} \left[\int_0^t \frac{V_1^2}{D} ds \right], \quad (\text{D.5.6})$$

onde usamos a isometria de Itô [37, 43] no passo intermediário e o vínculo $|\mathbf{V}| = \sqrt{D}$ no último passo.

Voltando à expressão (D.5.5), encontramos o limite superior

$$\begin{aligned} & \frac{\mathbb{E}[|v(t)|^2]}{3} \\ & \leq \mathbb{E}[|v_0|^2] + \frac{1}{2}\mathbb{E}\left[\left(\int_0^t v(s)ds\right)^2\right] + \frac{1}{2}\mathbb{E}\left[\left(\int_0^t \frac{V_1(s)}{D}ds\right)^2\right] + \mathbb{E}\left[\int_0^t \frac{V_1^2}{D}ds\right] \\ & \leq \mathbb{E}[|v_0|^2] + \frac{t}{2}\int_0^t \mathbb{E}[v(s)^2]ds + \left(\frac{t}{2D^2} + \frac{1}{D}\right)\int_0^t \mathbb{E}[V_1^2(s)]ds, \end{aligned} \quad (\text{D.5.7})$$

onde usamos a desigualdade de Schwartz nos segundo e terceiro termos do lado direito. Para obter um estimativa fechada, precisamos controlar o quão rápido $\mathbb{E}[V_1^2(s)]$ cresce no tempo. Para este fim, um cálculo de Itô padrão leva a

$$dV_1^2 = 2V_1dV_1 + \left(1 - \frac{V_1^2}{D}\right)dt, \quad (\text{D.5.8})$$

que fornece

$$d\mathbb{E}[V_1^2] = \left(1 - \frac{\mathbb{E}[V_1^2]}{D}\right)dt \leq dt, \quad (\text{D.5.9})$$

portanto

$$\int_0^t \mathbb{E}[V_1^2(s)]ds \leq \int_0^t (c_1^2 + s)ds = c_1^2t + \frac{t^2}{2}. \quad (\text{D.5.10})$$

Assim, encontramos um limite para $\mathbb{E}[|v(t)|^2]$ independente do componente V_1 ,

$$\mathbb{E}[|v(t)|^2] \leq 3\mathbb{E}[|v_0|^2] + \frac{3t}{2}\int_0^t \mathbb{E}[v(s)^2]ds + 3\left(\frac{t}{2D^2} + \frac{1}{D}\right)(c_1^2t + \frac{t^2}{2}) \quad (\text{D.5.11})$$

$$\leq 3\mathbb{E}[|v_0|^2] + \frac{3}{2D}\left(1 + \frac{T}{2D}\right)(2c_1^2T + T^2) + \frac{3T}{2}\int_0^t \mathbb{E}[v(s)^2]ds \quad (\text{D.5.12})$$

para o intervalo $[0, T]$ para qualquer $T > 0$. O lema de Gronwall [44], então, fornece o limite

$$\mathbb{E}[|v(t)|^2] \leq \left[3\mathbb{E}[|v_0|^2] + \frac{3}{2D}\left(1 + \frac{T}{2D}\right)(2c_1^2T + T^2)\right]e^{3Tt/2}. \quad (\text{D.5.13})$$

Para qualquer t finito, podemos fixar $T = t$ nesta estimativa. Portanto, no limite $D \rightarrow \infty$, temos para tempos finitos

$$\lim_{D \rightarrow \infty} \mathbb{E}[|v(t)|^2] \leq 3\mathbb{E}[|v_0|^2]e^{3t^2/2}, \quad (\text{D.5.14})$$

assegurando que, dadas condições iniciais tais que $v_0 = 0$, o processo V_1 converge em média quadrática ao processo unidimensional de *Ornstein-Uhlenbeck* de referência em $[0, T] \forall T < \infty$, assim demonstrando o teorema. \square

Note que o tipo de convergência obtido (convergência de média quadrática [43]) implica convergência em probabilidade em $C([0, T], \mathbb{R})$ para qualquer tempo $T > 0$.

D.6 Resultados numéricos

Para testar nossos resultados numéricos, fazemos uma análise numérica da equação de evolução (D.4.2) para V_1 , usando um método de Euler simples para a evolução temporal. Os termos de ruído são simulados a partir de números aleatórios gaussianos obtidos com o método de Box-Muller [43].

Para diferentes valores de D , mostramos a evolução dos processos V_1 , V_1' e v na figura D.1. De fato, de acordo com o Teorema D.4.1, para maiores valores de D , o processo v se aproxima de zero.

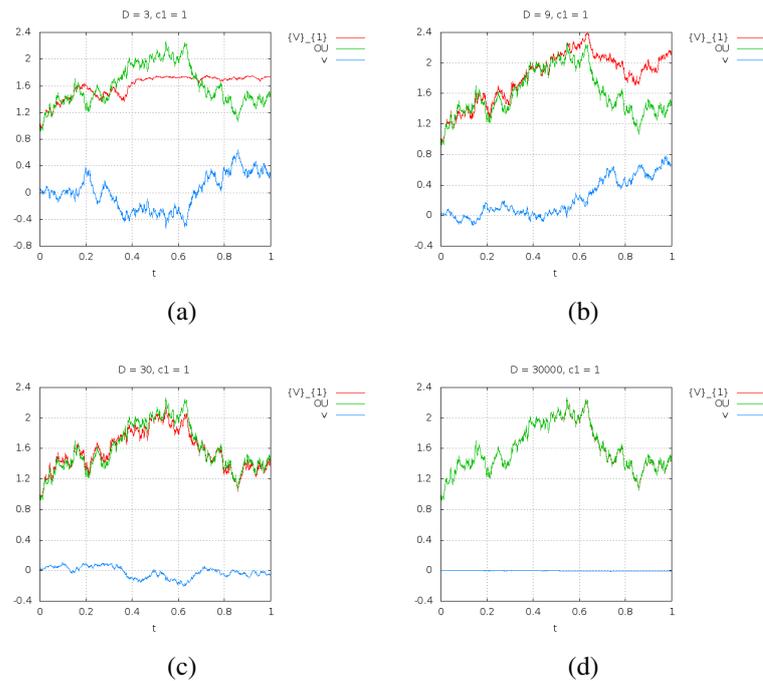


Figura D.1: Trajetórias, no espaço das velocidades. (a) mostra a evolução de um sistema de uma partícula, i. e. $D = 3$; a figura (b) possui $D = 9$; (c) $D = 30$ e (d) $D = 30000$. Todos os gráficos são feitos com 10^4 passos de tempo, $v_0 = 0$ e possuem $c_1 = 1$.

De acordo com nossa primeira estimativa expressa pela equação (D.4.7), esperamos que os resultados das simulações numéricas melhorem para valores menores de c_1 . Mostramos isso na figura D.2, onde um sistema de 10 partículas é simulado para diferentes valores da condição inicial c_1 .

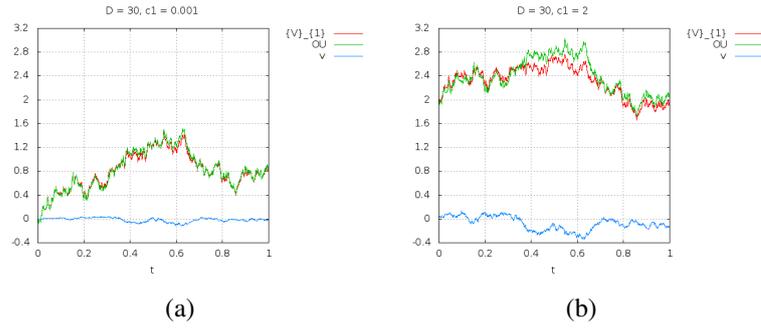


Figura D.2: Trajetórias, no espaço das velocidades. Ambos os gráficos são feitos com 10^4 passos de tempo, $v_0 = 0$ e $D = 30$. Vemos que (a) mostra uma melhor aproximação de V_1 por V_1' .

D.7 Movimento de d partículas

Este resultado pode ser generalizado se considerarmos, ao invés de uma única componente V_1 , um vetor d -dimensional \mathbf{U}_1 composto das primeiras d componentes de \mathbf{V} . Definimos

$$\mathbf{U}_1 = \sum_{i=1}^d V_i \hat{e}_i, \quad \mathbf{U}_2 = \sum_{i=d+1}^D V_i \hat{e}_i, \quad (\text{D.7.1})$$

para um d fixo, e reescrevemos (D.3.6) na forma

$$d\mathbf{U}_1 = \sigma_1(\mathbf{U}_1) \cdot d\mathbf{B}_1 - \frac{D-1}{2} \mathbf{b}_1(\mathbf{U}_1) dt - \mathbf{H}(\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2) \cdot d\mathbf{B}_2, \quad (\text{D.7.2})$$

$$d\mathbf{U}_2 = \sigma_2(\mathbf{U}_2) \cdot d\mathbf{B}_2 - \frac{D-1}{2} \mathbf{b}_2(\mathbf{U}_2) dt - \mathbf{H}^T(\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2) \cdot d\mathbf{B}_1, \quad (\text{D.7.3})$$

onde T denota a matriz transposta e

$$(\sigma_i)_{mn} = \delta_{mn} - \frac{(\mathbf{U}_i)_m (\mathbf{U}_i)_n}{|\mathbf{V}|^2}; \quad \mathbf{b}_i(\mathbf{U}_i) = \frac{\mathbf{U}_i}{|\mathbf{V}|^2}; \quad i = 1, 2 \quad (\text{D.7.4})$$

$$(\mathbf{H})_{mn} = \frac{(\mathbf{U}_1)_m (\mathbf{U}_2)_n}{|\mathbf{V}|^2} \quad (\text{D.7.5})$$

$$\mathbf{B}_1 = (B_1, \dots, B_d), \quad \mathbf{B}_2 = (B_{d+1}, \dots, B_D). \quad (\text{D.7.6})$$

Partindo deste novo ponto de vista, derivamos o seguinte

Teorema D.7.1 *Seja \mathbf{U}_1 o componente d -dimensional de \mathbf{V} evoluindo de acordo com a equação (D.7.2). Para $|\mathbf{V}| = \sqrt{D}$, o processo \mathbf{U}_1 com dados iniciais $\mathbf{U}_1(0) = \mathbf{c}_1 \in \mathbb{R}^d$ converge, no limite $N \rightarrow \infty$, ao processo de Ornstein-Uhlenbeck d -dimensional com dados iniciais \mathbf{c}_1 sujeito ao ruído \mathbf{B}_1 , onde a convergência é no sentido de média quadrática em $C([0, T], \mathbb{R}^d)$ para qualquer tempo $T > 0$.*

Estrutura da demonstração : A demonstração é similar à anterior, precisamos, apenas, definir o processo d -dimensional de Ornstein-Uhlenbeck de referência \mathbf{U}'_1 . Para este caso, a forma do limite superior final para $\mathbb{E}[|\mathbf{u}(t)|^2]$, com $\mathbf{u}(t) = \mathbf{U}_1(t) - \mathbf{U}'_1(t)$, é idêntica à (D.5.13), substituindo v por \mathbf{u} e c_1 por \mathbf{c}_1 .

Note que $|\mathbf{c}_1|^2$ independe de D (tipicamente $O(d)$), o que ainda implica em uma contribuição que vai a zero do segundo termo no lado direito da equação correspondente à (D.5.13). \square

D.8 O modelo com conservação de energia e momento

Nesta seção, saímos deste modelo com $N' = N - 1$ partículas efetivas para o modelo físico de N partículas, com interações conservando energia e momento. Nesta configuração, o vetor de componentes de velocidade \mathbf{V} assume valores na variedade

$$\mathbb{M}_{\bar{u}_0, e_0}^{3N-4} = \left\{ (\bar{V}_1, \dots, \bar{V}_N) : \sum_{i=1}^{3N} \frac{|V_i|^2}{2} = Ne_0 ; \sum_{k=1}^N \bar{V}_k = N\bar{u}_0 \right\}, \quad (\text{D.8.1})$$

onde \bar{u}_0 é o momento por partícula e os vetores \mathbf{V} e \bar{V}_k são similares (com o N original) àqueles definidos na Seção D.3. Esta variedade corresponde à esfera $(3N - 4)$ -dimensional de raio $\sqrt{2N\epsilon_0}$ centrada em $(\bar{u}_0, \dots, \bar{u}_0)$ e embutida no plano de momento constante, com $\epsilon_0 = e_0 - |\bar{u}_0|^2/2$.

Difusão em $\mathbb{M}_{\bar{u}_0, e_0}^{3N-4}$ pode ser definida com a equação diferencial de Stratonovich

$$d\mathbf{V} = \lambda P(\mathbf{S}) \cdot \circ d\mathbf{B}, \quad (\text{D.8.2})$$

onde os S_i 's são componentes dos vetores tridimensionais

$$\bar{S}_k = \bar{V}_k - \bar{u}_0 = (S_{3k-2}, S_{3k-1}, S_{3k}) \quad (\text{D.8.3})$$

e P é o projetor ortogonal em $\mathbb{M}_{\bar{u}_0, e_0}^{3N-4}$ dado por

$$P_{ij}(\mathbf{S}) = \sum_k \sigma_{ik}(\mathbf{S}) \left(\delta_{kj} - \sum_{\gamma=1}^3 \frac{E_k^\gamma E_j^\gamma}{N} \right) = \sigma_{ij}(\mathbf{S}) - \sum_{\gamma=1}^3 \frac{E_i^\gamma E_j^\gamma}{N}, \quad (\text{D.8.4})$$

com os vetores $3N$ -dimensionais E^γ , $\gamma = 1, 2, 3$, compostos de todas as componentes de N ve-

tores unitários em \mathbb{R}^3 ao longo da direção γ , viz.

$$\begin{aligned} E^1 &= (1, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 1, 0, 0) \\ E^2 &= (0, 1, 0, 0, 1, 0, \dots, 0, 1, 0) \\ E^3 &= (0, 0, 1, 0, 0, 1, \dots, 0, 0, 1) \end{aligned} \quad (\text{D.8.5})$$

e \mathbf{B} é, agora, o movimento Browniano padrão $3N$ -dimensional.

Kiessling and Lancellotti [56] usam a ortonormalização de Gram-Schmidt, $\mathbf{s} = \mathcal{R}\mathbf{V}$,

$$\bar{s}_n = \sqrt{\frac{N-n}{N-n+1}} \left[\bar{V}_n - \frac{1}{N-n} \sum_{i=n+1}^N \bar{V}_i \right] \quad \text{for } 1 \leq n \leq N-1, \quad (\text{D.8.6})$$

$$\bar{s}_N = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N \bar{V}_i, \quad (\text{D.8.7})$$

para mapear $\mathbb{M}_{\bar{u}_0, \varepsilon_0}^{3N-4}$ a

$$\left\{ (\bar{s}_1, \dots, \bar{s}_N) : \bar{s}_N = \sqrt{N} \bar{u}_0, \sum_{i=1}^{N-1} \frac{|\bar{s}_i|^2}{2} = N\varepsilon_0 \right\}. \quad (\text{D.8.8})$$

Como a matriz \mathcal{R} é ortogonal e \mathbf{B} é isotrópico, $\mathcal{R}\mathbf{B}$ também é um movimento Browniano padrão em \mathbb{R}^{3N} . Nesta nova representação, P é simplesmente a identidade nos primeiros $3(N-1)$ componentes, e zero nos últimos três.

Logo, podemos analisar o sistema original de N partículas com conservação de energia e momento, em termos do vetor truncado $(\bar{s}_1, \dots, \bar{s}_{N-1})$, com apenas conservação da “energia do referencial do centro de massa” (ε_0), e do vetor constante (\bar{s}_N) . Em particular, para a partícula $n=1$, encontramos $\bar{V}_1 = \bar{s}_1 \sqrt{(N-1)(N-2)/N} + \bar{s}_N/\sqrt{N}$, portanto $\bar{V}_1 - \bar{u}_0$ também converge ao processo de Ornstein-Uhlenbeck quando $N \rightarrow \infty$.

Efetivamente, podemos diretamente demonstrar a seguinte

PROPOSIÇÃO D.8.1 *Considere m partículas no modelo de N corpos (D.8.2) com momento total por partícula \bar{u}_0 e energia no referencial do centro de massa ε_0 dados. Sejam as velocidades iniciais das partículas $\bar{u}_0 + \bar{c}_k$ ($1 \leq k \leq m$). No limite $N \rightarrow \infty$, seus processos de velocidade $\bar{S}_k = \bar{V}_k - \bar{u}_0$ convergem para m processos de Ornstein-Uhlenbeck tridimensionais independentes, com condições iniciais \bar{c}_k e sujeitos ao ruído $\tilde{\mathbf{B}}_k = (B_{3k-2}, B_{3k-1}, B_{3k})$, onde a convergência é no sentido médio quadrático em $C([0, T], \mathbb{R}^{3m})$ para qualquer tempo $T > 0$.*

A demonstração segue aquela da Seção D.5. Para completar a demonstração, devemos notar

que $\sum_{k=1}^N \bar{S}_k = 0$ e que, no limite $N \rightarrow \infty$, o processo

$$\tilde{B}_1 - \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \tilde{B}_k \quad (\text{D.8.9})$$

converge, no sentido médio quadrático, a \tilde{B}_1 . Para mostrar isto, é suficiente usar a expressão (D.5.6) com as substituições $V_1 V_i \rightarrow 1$ e $D \rightarrow N$.

D.9 Conclusões

Um sistema tridimensional de N partículas, no qual partículas interagem estocasticamente devido a um termo de ruído Browniano, no qual a energia total é conservada é modelado por um processo de difusão na esfera $\mathbb{M}_{e_0}^{3N-1}$. No limite de $N \rightarrow \infty$, uma única componente de velocidade evolui independentemente de todas as outras componentes para tempos finitos. Além disso, a evolução desta componente “destacada” converge a um processo de Ornstein-Uhlenbeck unidimensional sujeito ao termo de ruído acoplado à sua direção. O papel da fricção no modelo usual de Ornstein-Uhlenbeck de manter a componente de velocidade limitada é, aqui, dado pela conservação da energia total e pela curvatura da esfera (faixas equatoriais têm área maior do que as polares).

Formalmente, a convergência para o processo de Ornstein-Uhlenbeck é demonstrada usando argumentos padrão (ver Seção 5.2 de [37]). Na linguagem de [43], obtemos *convergência média-quadrática* para o processo de velocidade em (D.5.14). Lembramos que convergência média-quadrática implica em convergência em probabilidade.

Uma extensão imediata é dada para o processo de velocidade d -dimensional. No limite $D \rightarrow \infty$, mostramos que este converge ao processo de Ornstein-Uhlenbeck d -dimensional. Se em um tempo inicial as d componentes destacadas são independentes, a evolução subsequente destas d componentes preserva sua independência, o que leva à propagação do caos molecular.

Para o modelo com conservação da energia e do momento, mostramos que as velocidades de m partículas destacadas convergem, no limite $N \rightarrow \infty$, a m processos de Ornstein-Uhlenbeck tridimensionais sujeitos aos seus respectivos ruídos tridimensionais.

Referências Bibliográficas

- [1] Tonks L., Langmuir I.: Oscillations in ionized gases. *Phys. Rev.* **33** (1929) 195–211.
- [2] Chen F. F.: Introduction to plasma physics and controlled fusion. Plenum Press, New York and London (1985).
- [3] Jackson J. D.: Classical Electrodynamics. Wiley and Sons, USA (1999).
- [4] Akhiezer A., *et al.*: Plasma electrodynamics. Volume 1: Linear theory. Pergamon Press, Oxford (1975).
- [5] Klimontovich Y. L.: The statistical theory of non-equilibrium processes in a plasma. Pergamon Press, Oxford (1967).
- [6] Landau L. D., Lifshitz E. M.: Electrodynamics of continuous media. Pergamon Press, Oxford (1960).
- [7] Balescu R.: Statistical Dynamics. Imperial College Press, Singapore (2000).
- [8] Liboff R. L.: Kinetic Theory: Classical, Quantum and Relativistic Descriptions. Springer, New York (2003).
- [9] Campa A., Dauxois T., Ruffo S.: Statistical mechanics and dynamics of solvable models with long-range interactions. *Physics Report* **480** (2009) 57–159.
- [10] Antoni M., Ruffo S.: Clustering and relaxation in Hamiltonian long-range dynamics. *Phys. Rev. E* **52** 3 (1995) 2361–2374.
- [11] Elskens Y., Escande D.: Microscopic dynamics of plasmas and chaos. IoP Publishing, Bristol (2003).
- [12] Pathria R. K., **Statistical Mechanics**. Second ed., Butterworth Heinemann, Oxford, 1997.
- [13] Neunzert H.: An introduction to the nonlinear Boltzmann-Vlasov equation. In: Cercignani C.: Kinetic Theories and the Boltzmann Equation. Ed. Lect. Notes Math. **1048** (Springer, Berlin, 1984) 60–110.
- [14] Spohn H.: Large scale dynamics of interacting particles. Springer, Berlin (1991).
- [15] Braun W., Hepp K.: The Vlasov dynamics and its fluctuations in the $1/N$ limit of interacting classical particles. *Commun. math. Phys.* **56** (1977) 125–146.
- [16] Firpo M-C., Elskens Y.: Kinetic limit of N-body description of wave-particle self-consistent interaction. *J. Stat. Phys.* **93** (1998) 193–209.
- [17] Kiessling M. K.-H.: Microscopic derivations of Vlasov equations. *Commun. Nonlin. Sci. Numer. Simul.* **13** (2008) 106–113.

- [18] Ribeiro B. V., Elskens Y.: Kinetic Limit of dynamical description of wave-particle self-consistent interaction in an open domain. In: Gibert T., Kirkilonis M., Nicolis G.: Proceedings of the European Conference on Complex Systems 2012. Springer Proceedings in Complexity (Springer, 2013) – To be published.
- [19] Elskens Y.: Finite- N dynamics admit no traveling-wave solutions for the Hamiltonian XY model and single-wave collisionless plasma model. ESAIM: Proceedings, EDP Sciences, SMAI 2001.
- [20] Elskens Y.: Gaussian Convergence for Stochastic Acceleration of N Particles in the Dense Spectrum Limit. *J. Stat. Phys.* (2012) 148:591-605
- [21] Firpo M-C., Doveil F., Elskens Y., Bertrand P., Poleni M., Guyomarc'h D.: Long-time discrete particle effects versus kinetic theory in the self-consistent single-wave model. *Phys. Rev. E* **64** (2001) 026407.
- [22] Firpo M-C., Leyvraz F., Attuel G.: Equilibrium statistical mechanics for single waves and wave spectra in Langmuir wave-particle interaction. *Phys. of Plasmas* **13** (2006) 122302.
- [23] Leyvraz F., Firpo M-C., Ruffo S.: Inhomogeneous quasi-stationary states in a mean-field model with repulsive cosine interactions. *J. Phys. A: Math. Gen.* **35** (2002) 4413-4427.
- [24] Ettoumi W., Firpo M-C.: Stochastic treatment of finite- N effects in mean-field systems and its application to the lifetimes of coherent structures. *Phys. Rev. E* **84** (2011) 030103(R).
- [25] Tatekawa T., Bouchet F., Dauxois T., Ruffo S.: Thermodynamics of the self-gravitating ring model. *Phys. Rev. E* **64** (2001) 026407.
- [26] Rocha Filho T. M., Figueiredo A., Amato M. A.: Entropy of Classical Systems with Long-Range Interactions. *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 190601.
- [27] Figueiredo A., Rocha Filho T. M., Amato M. A.: Ergodicity and central-limit theorem in systems with long-range interactions. *Europhysics Lett.* **83** (2008) 30011.
- [28] Rocha Filho T. M., Amato M. A., Figueiredo A.: A novel approach to the determination of equilibrium properties of classical Hamiltonian systems with long-range interactions. *J. Phys. A: Math. Theor.* **42** (2009) 165001.
- [29] Rocha Filho T. M., Amato M. A., Mello B. A., Figueiredo A.: Phase transitions in simplified models with long-range interactions. *Phys. Rev. E: Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Phys.* **84** (2011) 041121.
- [30] Rocha Filho T. M., Amato M. A., Figueiredo A.: Nonequilibrium phase transitions and violent relaxation in the Hamiltonian mean-field model. *Phys. Rev. E: Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Phys.* **85** (2012) 062103.
- [31] Ribeiro B. V., Elskens Y., Amato M. A.: Brownian corrections to particle motion in the Hamiltonian Mean Field model. To be presented at *XIII Latin American Workshop on Nonlinear Phenomena*. URL:(<http://www.famaf.unc.edu.ar/lawnp2013/images/PBookAbstracts.pdf>)
- [32] Casetti L., Nardini C.: A solvable model of a self-gravitating system. *J. Stat. Mech.* (2010) P05006.

- [33] Antoni M., Ruffo S., Torcini A.: First- and second-order clustering transitions for a system with infinite-range attractive interaction. *Phys. Rev. E* **64** (2001) 026407.
- [34] Pakter R., Levin Y.: Core-Halo Distribution in the Hamiltonian Mean-Field Model. *Phys. Rev. Lett.* **106** (2011) 200603.
- [35] Elskens Y., Kiessling M. K.-H., Ricci V.: The Vlasov Limit for a System of Particles which Interact with a Wave Field. *Commun. Math. Phys.* **285** (2008) 673–712.
- [36] Laffay V.: Dynamique Hamiltonienne d'une particule dans des ondes électrostatiques, Un exemple de système physique vu par les mathématiciens. Rapport de stage, Université de Strasbourg (2010-2011) Maître de stage: Yves Elskens.
- [37] Øksendal B.: *Stochastic Differential Equations - An introduction with Applications*. Sixth Ed., Springer, (2010).
- [38] Uhlenbeck G. E., Ornstein L. S.: On the Theory of the Brownian Motion. *Phys. Rev.* (1930) **36** 823-41
- [39] Kiessling M., Lancellotti C.: The Linear Fokker-Planck Equation for the Ornstein-Uhlenbeck Process as an (Almost) Nonlinear Kinetic Equation for an Isolated N-Particle System. *J. Stat. Phys.* **123** 3 (2006) 525-46.
- [40] Stroock D. W.: On the Growth of Stochastic Integrals. *Z. Wahrscheinlichkeitstheorie verw. Geb.* **18** (1971) 340-44.
- [41] Brillinger D. R.: A Particle Migrating Randomly on a Sphere. *J. Th. Probability* **10** No. 2 (1997) 429-43.
- [42] Wong E., Zakai M.: On the Convergence of Ordinary Integrals to Stochastic Integrals. *The Annals of Math. Stat.*, **36** No. 5 (1965) 1560-64.
- [43] Kloeden P. E., Platen E., Schurz H.: *Numerical Solution of SDE Through Computer Experiments*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York (2003).
- [44] Dieudonné J.: *Calcul Infinitésimal*. Herman Paris, Collection Méthodes (1980).
- [45] Boyce W. E., DiPrima R. C.: *Elementary Differential Equations and Boundary Value Problems*. John Wiley & Sons, Inc., Ninth Edition (2009).
- [46] Antoniazzi A., Elskens Y., Fanelli D., Ruffo S.: Statistical mechanics and Vlasov equation allow for a simplified Hamiltonian description of Single-Pass Free Electron Laser saturated dynamics. *Eur. Phys. J B*, **50** (2006) 603-611.
- [47] Barré J., Dauxois T., Ruffo S.: Clustering in a model with repulsive long-range interactions. *Physica A*, **295** (2001) 254-260.
- [48] Yoshida H.: Construction of higher order symplectic integrators. *Phys. Lett. A*, **150** (1990) 262-268.
- [49] Y. Elskens, Finite- N dynamics admit no traveling-wave solutions for the hamiltonian XY model and single-wave collisionless plasma model, *ESAIM Proc.* 10 (2001) 211-215 F. Coquel and S. Cordier (eds) <http://www.esaim-proc.org/articles/proc/pdf/2001/01/elskens.pdf> DOI: 10.1051/proc:2001008

- [50] Doveil F., Escande D., Macor A.: Experimental observation of nonlinear synchronization due to a single wave. *Phys. Rev. Lett.*, **94** (2005) 085003.
- [51] Carlen, E.A., Gangbo, W., *Solution of a model Boltzmann equation via steepest descent in the 2-Wasserstein metric*. Arch. Rational Mech. Anal. **172** (2004) 21-64.
- [52] Carlen, E.A., Carvalho, M.C., Loss, M., *Determination of the spectral gap for Kac's master equation and related stochastic evolution*. Acta Math. **191** (2003) 1-54.
- [53] Jacobs, K., **Stochastic processes for physicists: Understanding noisy systems**. Cambridge university press, Cambridge, 2010.
- [54] Kac, M., *Foundations of kinetic theory*, pp. 171–197 in **Proc. 3rd Berkeley Symp. Math. Stat. Prob.** (ed. J. Neyman) **3**. University of California, Berkeley and Los Angeles, 1956.
- [55] Kac, M., **Probability and related topics in physical sciences**. American mathematical society, Providence, 1959.
- [56] Kiessling, M., Lancellotti, C., *The linear Fokker-Planck equation for the Ornstein-Uhlenbeck process as an (almost) nonlinear kinetic equation for an isolated N-particle system*. J. Stat. Phys. **123** (2006) 525-546.
- [57] Mischler, S., Mouhot, C., *Kac's program in kinetic theory*, arXiv:1107.3251 [math.AP].
- [58] Protter, Ph.E., **Stochastic integration and differential equations**. Second ed. version 2.1, Springer, Berlin, 2005.
- [59] Vakeroudis, S., Yor, M., *A central limit theorem for a sequence of brownian motions in the unit sphere in \mathbb{R}^n* , arXiv : 1107.3230 [math.PR].
- [60] Ribeiro, B. V., Elskens, Y., *Ornstein-Uhlenbeck limit for the velocity process of an N-particle system interaction stochastically*. J. Stat. Phys. **153** (2014) 626-640.