

Cíntia Helena Claudino Silvestre

**Ergodicidade em sistemas autogravitantes
em duas e três dimensões**

Brasília, DF, Brasil.

24 de fevereiro de 2012.

Cíntia Helena Claudino Silvestre

Ergodicidade em sistemas autogravitantes em duas e três dimensões

Dissertação apresentada ao Instituto de Física da Universidade de Brasília como parte dos requisitos necessários para obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador:

Tarcísio Marciano da Rocha Filho

INSTITUTO DE FÍSICA
UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

Brasília, DF, Brasil.

24 de fevereiro de 2012.

“Ergodicidade em sistemas autogravitantes em duas e três dimensões”

Por

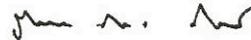
Cíntia Helena Claudino Silvestre

Dissertação submetida ao Instituto de Física da Universidade de Brasília como parte dos requisitos para a obtenção do grau de mestre em Física.

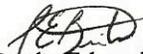
Aprovada por:



Prof. Tarcísio Marciano da Rocha Filho
IF/UnB



Prof. Marco Antônio Amato
IF/UnB



Prof. Paulo Eduardo de Brito
FUP/UnB

Prof. Dr. Ademir Eugênio de Santana
Coordenador de Pós-Graduação
Instituto de Física

Renova-te. Renasce em ti mesmo.
Multiplica os teus olhos, para
verem mais. Multiplica-se os teus
braços para semeares tudo. Destrói
os olhos que tiverem visto. Cria
outros, para as visões novas.
Destrói os braços que tiverem
semeado, Para se esquecerem de
colher. Sê sempre o mesmo.
Sempre outro. Mas sempre alto.
Sempre longe. E dentro de tudo.

Cecília Meireles

A honra deste trabalho é dedicada àqueles que contibuíram de maneira ímpar com minha edificação enquanto pessoa e profissional, meus queridos pais, ao meu amor que me inundou de carinho e companheirismo em todos os momentos desta árdua caminhada e a todos aqueles que me deram apoio sempre que necessário ao longo desta trajetória e colaboraram, cada qual ao seu modo, com o transpor de mais uma etapa.

Agradecimentos

Agradeço de maneira singular ao meu orientador, Professor Tarcísio Marciano da Rocha Filho, que me acolheu, apoiou e instruiu com primazia, agradeço sua atenção, dedicação e paciência sempre ilimitadas.

À minha família adorada que foi e é um verdadeiro sustentáculo em minha vida. Especificamente agradeço ao meu pai, José Silvestre da Silva, homem ao qual rendo infinda admiração, à minha mãe, Cecília Claudino Silvestre, a rainha de minha vida. Ao meu amado Estéfano Pietragalla, meu companheiro sob toda e qualquer circunstância, quem sempre me acalma e traz a paz necessária. Sou muito grata pela sua compreensão e paciência incondicionais.

Aos meus amigos e colegas de graduação, que jamais serão esquecidos, os quais fizeram parte do meu crescimento pessoal e profissional.

Aos meus queridos amigos e colegas do Instituto de Física da UnB, meus parceiros de batalha Daniel e Regina, em especial Bruno e Natália, pelos quais tenho inenarrável estima, agradeço pela amizade, amparo, por estarem sempre disponíveis a me auxiliar no que quer que fosse.

Aos professores do Instituto de Física, por tudo que me ensinaram ao longo desses anos e pela contribuição ímpar à minha formação acadêmica. Em especial agradeço ao professor Ademir Santana, a quem recorri nos momentos mais complicados e não hesitou em me amparar.

Aos meus amigos de modo geral e em especial às minhas amigas de infância,

Agradecimentos

Suiane e Camila, que sempre me acompanham e apoiam incondicionalmente e foram capazes de compreender meus momentos de ausência em virtude desta labuta.

Às demais pessoas queridas, cuja memória me falha e não foram adequadamente citadas neste trabalho.

Agradeço também à CAPES pelo apoio a este trabalho.

Resumo

Sistemas com interações de longo alcance se aplicam a diversas situações físicas como, por exemplo, plasmas carregados, sistemas autogravitantes e diversos modelos como modelo Hamiltoniano de Campo Médio (HMF-Hamiltonian Mean Field) e interações de vórtices, sistemas hidrodinâmicos bidimensionais. São notoriamente interessantes por, entre outras razões, apresentarem diversas peculiaridades, como calor específico negativo, difusão anômala, inequivalência de ensembles estatísticos, estados quasi-estacionários não-gaussianos e, sobretudo, relaxação violenta, que é o processo de evolução de curto intervalo de tempo pelo qual passa o sistema, que parte de uma condição inicial fora do equilíbrio para um estado quasi-estacionário, após o qual o sistema evolui lentamente até atingir o equilíbrio gaussiano. Um aspecto de notável importância dos sistemas com interações de longo alcance é o critério de ergodicidade, que recebe destaque neste trabalho. A fim de analisar as propriedades desses sistemas ao longo de sua evolução temporal, sobretudo sua ergodicidade, utilizamos simulações computacionais com diferentes condições iniciais para sistemas de duas e três dimensões, e verificamos que a condição de ergodicidade só é satisfeita para tempos da ordem do necessário para atingir o equilíbrio termodinâmico, sendo assim uma possível explicação para a falha da teoria de Lynden-Bell de relaxação violenta.

Abstract

Systems with long-range interactions are applicable to different physical situations as, for example, charged plasma, self-gravitating systems, Hamiltonian mean field (HMF) model, two-dimensional fluids. These systems are remarkably interesting for, besides others reasons, present several characteristics, for example, negative specific heat, anomalous diffusion, ensemble inequivalence, non-Gaussian quasi-stationary states and, particularly, violent relaxation, which is a process of evolution in a system that happens in a short period of time from the initial condition into a quasi-stationary state, after this it evolves slowly until reaches the Gaussian equilibrium. A relevant aspect of systems with long range interactions is the ergodicity, fundamental in this work. To analyze these systems and their aspects during the temporal evolution, especially their ergodicity, we used computational simulations with different initial conditions for systems with two and three dimensions, than, we verified that the ergodicity condition is satisfied for times of order the time necessary to reach the thermodynamic equilibrium, which is an explanation to the failure in Lynden-Bell theory for violent relaxation.

Sumário

Lista de Figuras

1	Introdução	13
2	Primeiros Conceitos	16
2.1	Interações de longo alcance: Uma visão geral	16
2.2	Propriedades dos sistemas de interação de longo alcance	17
2.2.1	Inequivalência de ensembles estatísticos	18
2.2.2	Calor específico negativo	19
2.3	Relaxação Violenta em sistemas com interações de longo alcance . . .	21
2.4	Teorema do Limite Central	29
3	Dinâmica do espaço de fase	32
3.1	Teorema de Liouville	32
3.2	Ergodicidade	35
4	Métodos utilizados nas simulações computacionais	41
4.1	Integrador Simplético	41
4.2	O Problema do integrador de Hermite	46

5	Interações de longo alcance em sistemas bidimensionais	48
5.1	O modelo bidimensional	48
5.2	Escolha das condições iniciais	49
5.3	Convergência para a Gaussiana	50
5.4	Análise da ergodicidade	52
5.4.1	Distribuição das velocidades	53
5.4.2	Gaussianização	54
5.4.3	Desvio padrão das velocidades	54
6	Interações de longo alcance em sistemas tridimensionais	56
6.1	Escolha das condições iniciais	56
6.2	Ergodicidade	59
6.2.1	Desvio padrão das velocidades	61
7	Conclusão	63
	Apêndice A - Algoritmos numéricos utilizados	65
A.1	Integrador simplético	65
A.2	Programa N-body	72
	Referências	83

Lista de Figuras

1	Gráficos da Força para os casos do anel e caso circular para um sistema bidimensional.	50
2	Gráficos do momento M_3 para os casos de anel e circular para um sistema bidimensional.	52
3	Distribuição das velocidades em y para os casos do anel e circular em um sistema bidimensional.	53
4	Gráficos de M_4 para \bar{v}_x e \bar{v}_y (variáveis reduzidas) para os casos de anel e circular para um sistema bidimensional.	54
5	Sigma: Desvio padrão das velocidades para o anel para $N = 2000$, $t_{crit} = 10^4$, erro máximo $\epsilon = 10^{-3}$, raio menor $R_1 = 40.0$ e raio maior $R_2 = 50.0$. Ao se aproximar do equilíbrio obedece à função da forma $y = 0.033341.x^{-0.936933}$ sob coeficiente de correlação= 0.99982.	55
6	Gráfico monolog da energia para 2000 partículas com $\Delta t_S = 10.0$ para o caso da casca esférica e para o caso esférico.	58
7	Gráficos das componentes do momento para $N=2000$ partículas com diferentes Δt_S	59
8	Gráficos dos momentos M_3 e M_4 para o caso da casca esférica com diferentes Δt_S e para o caso esférico com $\Delta t_S = 10.0$	60

Lista de Figuras

9	Gráficos do desvio padrão entre a média das velocidades do ensemble de partículas e média da velocidade de uma partícula para a componente x considerando um sistema de 2000 partículas com diferentes Δt_S	62
---	---	----

1 Introdução

Sistemas físicos com interações de longo alcance têm sido amplamente explorados na literatura, e muitos pontos ainda permanecem em aberto, compreendem os mais diversos sistemas físicos, como sistemas autogravitantes, plasmas carregados, interações de dipolos, modelo de Hamiltoniano de Campo Médio (HMF- Hamiltonian Mean Field), lasers de elétron livre, sistemas hidrodinâmicos bidimensionais e fraturas em sólidos [1]. Esses sistemas possuem características bem distintas com relação a sistemas com interação de curto alcance, tais como: inequivalência de ensembles canônico e microcanônico, calor específico negativo, difusão anômala, estados quasi-estacionários não-gaussianos, entre outros [2].

Na análise da evolução temporal de um sistema inicialmente em um estado fora do equilíbrio, nota-se que ele passa por um processo de relaxação bastante rápido que leva o sistema para o estado quasi-estacionário, onde permanece por um período longo e evolui gradativa e lentamente para o equilíbrio gaussiano. Esse tipo de relaxação foi estudada com maior riqueza de detalhes por Lynden-Bell em 1967 [3], que a denominou relaxação violenta. Nesse trabalho o autor obtem o estado após a relaxação violenta a partir do estado inicial, estimando a ordem de grandeza do tempo de relaxação. Uma das conclusões obtidas é que sua teoria ainda não seria satisfatória por apresentar algumas falhas. Vários outros autores abordaram o problema da relaxação violenta, e podem essencialmente ser divididos em dois grupos, o primeiro que inclui Lynden-Bell e Nakamura [4], que tem uma

abordagem que trabalha com a maximização da entropia e o segundo, com um perfil fundamentalmente heurístico, que inclui Shu [5], Stiavelli e Bertin [6], Spergel e Hernquist [7], Treumann e Böhringer [8], Trenti e Bertin [9]. Em nosso trabalho daremos mais atenção às do primeiro grupo, essencialmente a de Lynden-Bell e a de Nakamura.

Um sistema é dito possuir interações de longo alcance quando seu potencial de interação decresce com $r^{-\nu}$ em que $\nu \leq d$, onde d é dimensão do espaço [10]. Portanto, sistemas com potencial gravitacional possuem interações de longo alcance. Neste trabalho em particular, abordamos os sistemas autogravitantes em duas e três dimensões espaciais. Uma aplicação relevante é a de formação de galáxias elípticas [11]. Como já dito, esses sistemas são ricos em características diversas, o aspecto que ganha maior destaque neste trabalho é a questão da ergodicidade.

Para determinar se o sistema é ergódico determinamos o desvio padrão da média temporal da velocidade de cada partícula do sistema. O sistema é considerado ergódico quando esse desvio padrão é nulo ou tende a zero [12].

A ergodicidade e outros aspectos foram analisados para sistemas em duas e três dimensões, utilizamos simulações computacionais. Em nossas simulações utilizamos os métodos de integração de Hermite [13] e o integrador simplético [14].

No segundo capítulo fazemos a introdução dos primeiros conceitos acerca dos sistemas com interações de longo alcance. São discutidas as propriedades destes sistemas, exploramos a inequivalência de ensembles, mostrando que o calor específico pode ser negativo, e descrevemos as teorias de Lynden Bell [3] e Nakamura [4] para relaxação violenta. Enunciamos e discutimos o Teorema do Limite Central (TLC), com referência no modelo HMF (Hamiltonian Mean Field) discutido na referência [1].

A descrição da dinâmica do espaço de fase é feita no capítulo 3, nele introduzimos o teorema de Liouville para sistemas de dinâmica Hamiltoniana utilizando a equação de continuidade para a corrente de probabilidade e as equações de Hamilton. Em seguida, abordamos o tema ergodicidade, fazemos a descrição matemática de onde se origina para então estabelecer o significado de sistema ergódico.

O capítulo 4 é destinado aos métodos computacionais utilizados nas simulações, abordamos os integradores simpléticos de quarta ordem e também de ordens superiores [15], [14], esse tipo de integração foi utilizado para os sistemas bidimensionais. Para os sistemas tridimensionais utilizamos o método de integração de Hermite [13] e, sobretudo, o programa elaborado por Aarseth [13], [11] para N partículas, com modificações.

Os capítulos 5 e 6 apresentam os resultados das simulações para os sistemas bidimensionais e tridimensionais, respectivamente. Neles analisamos os dados obtidos para a evolução temporal das energias potencial e cinética, a evolução da distribuição de velocidades para uma gaussiana, os momentos dessa distribuição, e verificamos como o sistema se torna ergódico com o tempo analisando o desvio padrão das velocidades ao longo do tempo.

2 Primeiros Conceitos

2.1 Interações de longo alcance: Uma visão geral

Sistemas com interações de longo alcance possuem características que os distinguem claramente dos sistemas com interações de curto alcance. Como exemplos fisicamente relevantes de tais sistemas podemos citar: sistemas autogravitantes, plasmas, interações de dipolos, modelo de Hamiltoniano de Campo Médio (HMF-Hamiltonian mean field), lasers de elétron livre, sistemas hidrodinâmicos bidimensionais, fraturas em sólidos [1]. Um grande ponto a salientar é que embora sua relevância ainda existem muitos problemas em aberto nessa área de pesquisa, tais como: inequivalência de ensembles estatísticos, salto de temperatura em pontos críticos, estados quasi-estacionários não-gaussianos, calor específico negativo, difusão anômala, etc, que se manifestam nas primeiras [2]. É interessante notar que sistemas de pequeno porte com interação de curto alcance podem apresentar propriedades típicas de sistemas com interações de [2] longo alcance. Um potencial de longo alcance é considerado de longo alcance quando decai com $r^{-\nu}$ em que $\nu \leq d$, onde d é dimensão do espaço.

A evolução temporal do sistema também é peculiar quando comparada à dos sistemas de curto alcance. Em um primeiro momento ele passa por um processo denominado Relaxação Violenta, termo utilizado pioneiramente por Lynden-Bell [3] em 1967, esse processo, de maneira sucinta, por assim dizer, é caracterizado

essencialmente por uma rápida evolução do estado inicial para um estado quasi-estacionário. Lynden-Bell foi o primeiro a desenvolver uma teoria para descrever o processo de relaxação violenta. Sua proposta no entanto se mostrou limitada, uma vez que sua teoria mostra incoerências com experimentos. Algumas outras propostas se seguiram procurando superar essas limitações, tais como: Shu (1978), Stiavelli Bertin (1987), Spergel e Hernquist (1992), Kull, Treumann e Bohringer (1997), Nakamura (2000) e Trenti e Bertin (2002), Yan Levin (2008). Ainda que hajam tantas teorias descrevendo a relaxação violenta não existe ainda uma que seja de fato satisfatória em todos seus aspectos.

Em sistemas com interações de longo alcance o estado quasi-estacionário tem um tempo de vida que diverge com o número N de partículas. Para tempos suficientemente longos o sistema relaxa para o equilíbrio termodinâmico, e para $N \rightarrow \infty$ o sistema permanece sempre no estado quasi-estacionário [16]. Sendo que a consequência do limite para tempos suficientemente longos prepondera sobre a do limite de partículas caso ambos ocorram.

Sistemas com interações de longo alcance não são aditivos [2]. Isso pode levar a importantes consequências, uma delas é a quebra de ergodicidade.

2.2 Propriedades dos sistemas de interação de longo alcance

Vamos agora discutir características dos sistemas com interação de longo alcance que os colocam à parte dos sistemas de curto alcance.

2.2.1 Inequivalência de ensembles estatísticos

A princípio é um tanto quanto inesperado que alguns sistemas apresentem inequivalências entre os ensembles microcanônico e canônico. Alguns exemplos são as interações gravitacionais, cuja característica de inequivalência de ensembles foi originalmente observada por Antonov (1962) [17] e o teorema do Virial, cuja forma escalar é dada por $2K + W = 0$ [11]. Um outro exemplo é o modelo BEG (Blume-Emery-Griffiths) como discutido por **Barré** [17] que nos mostra o principal motivo dessa inequivalência. Trata-se de um modelo com infinitas classes de interações, é o modelo mais simples conhecido que exhibe linhas de transição contínuas e de primeira ordem, nesse trabalho, **Barré** analisa os diagramas de fase do modelo nos ensembles canônico e microcanônico. No modelo BEG- spin 1 o ensemble canônico exibiu um diagrama de fase com uma transição contínua no ponto crítico, enquanto que no ensemble microcanônico o sistema possui calor específico negativo e um salto na temperatura.

Desses exemplos vemos que as descrições de ensemble microcanônico e de ensemble canônico podem ser distintas para alguns sistemas. Os dois ensembles correspondem a diferentes vínculos físicos sobre o sistema, energia ou temperatura constantes, o que pode levar a diferentes propriedades físicas quando consideradas as interações de longo alcance. Gibbs notou, em 1902, que os dois ensembles, que são descrições distintas, levam a previsões no limite termodinâmico que podem ser equivalentes ou inequivalentes[18], muitos outros trabalhos posteriores revelaram o mesmo comportamento. A equivalência ou não dos dois ensembles depende do tipo de interação presente no sistema em análise.

Desde a década de 1960, pesquisadores, como Lynden-Bell e Wood, por exemplo, já começaram a verificar exemplos de sistemas analisados sob o olhar da mecânica estatística em que as propriedades do ensemble microcanônico eram diferentes do

comportamento no caso da descrição canônica[19]. Elis et al. formularam uma teoria matemática que explica a inequivalência de ensembles de uma maneira sólida.

A inequivalência de ensembles ocorre quando a função de entropia microcanônica por partícula para um sistema com n partículas é dada por:

$$s(u) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \Omega(u), \quad (2.1)$$

onde $\Omega(u)$ é a densidade de microestados com energia interna por partícula u . Apresenta um ou mais intervalos não-côncavos que fazem s' , a primeira derivada de $s(u)$, uma função não monotônica de u .

Nesse caso, $s(u)$ não pode ser expressa como a transformada de Legendre da função de energia livre:

$$\varphi(\beta) = \lim_{n \rightarrow \infty} -\frac{1}{n} \ln Z(\beta), \quad (2.2)$$

onde $Z(\beta)$ é a função de partição. Por outro lado, se s' existir para todo u e for monotônica, s é então a transformada de Legendre de $\varphi(\beta)$:

$$s(u) = \beta(u)u - \varphi(\beta(u)), \quad (2.3)$$

com $\beta(u) = s'(u)$, que corresponde à equivalência dos ensembles canônico e microcanônico.

2.2.2 Calor específico negativo

A questão do calor específico negativo é bem conhecida no contexto da astrofísica como consequência do teorema do virial, foi abordada e discutida por Maxwell [20], Thirring [21], Lynden-Bell [22], entre outros. É razoável a existência do calor

específico negativo para a astronomia, uma vez que se sabe que quando uma estrela ou um conjunto delas perde energia sua temperatura aumenta de acordo com o teorema do virial. O mesmo acontece com buracos negros, como demonstrado por Beckestein e Hawking[23] em 1974. À primeira vista isso seria um paradoxo, já que um resultado bem conhecido em mecânica estatística é que o calor específico deve ser sempre positivo.

Consideramos um sistema extensivo uniforme e dividido em partes de modo que o calor possa fluir entre elas. A segunda lei da termodinâmica afirma que o calor flui da parte mais quente para a mais fria, levando a um gradiente de temperatura. Se o calor específico for negativo a diferença de temperatura aumenta, gerando conseqüentemente um aumento também do fluxo de calor, impossibilitando que o sistema atinja o equilíbrio termodinâmico. A positividade do calor específico é assim uma condição de estabilidade do sistema.

Se considerarmos um sistema descrito pelo ensemble canônico de Gibbs, sua energia interna, considerando níveis de energia E_i é dada por

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_i E_i e^{-\beta E_i}}{Z} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}, \quad (2.4)$$

sendo Z a função de partição. O calor específico é sempre positivo, pois

$$C_v = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \propto \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle > 0. \quad (2.5)$$

Por outro lado, o teorema do virial para um sistema autogravitante nos dá [11]:

$$2 \langle E_c \rangle + \langle E_{pot} \rangle = 0, \quad (2.6)$$

onde $\langle E_c \rangle$ e $\langle E_{pot} \rangle$ são as médias estatísticas das energia cinética e potencial, respectivamente, para uma distribuição de posições e velocidades estacionária.

Temos então que:

$$E = \langle E_c \rangle + \langle E_{pot} \rangle = - \langle E_c \rangle, \quad (2.7)$$

e portanto:

$$C_v = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \propto \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial E_c} < 0. \quad (2.8)$$

Apesar de (2.5) e (2.8) aparentarem uma contradição salientamos que ela ocorre porque estamos aplicando a teoria a diferentes ensembles, ao canônico e ao microcanônico, que se utilizam de diferentes critérios, e portanto, faz sentido obtermos resultados diferentes em cada um deles.

Além do contexto astrofísico, tem-se encontrado experimentalmente calor específico negativo microcanônico para sistemas pequenos [11]. Um deles é a fragmentação nuclear, em que foram feitas medidas consecutivas durante a colisão entre átomos de Au.

2.3 Relaxação Violenta em sistemas com interações de longo alcance

Sistemas com muitas partículas com forças de longo alcance, que inicialmente não estão no estado de equilíbrio usualmente oscilam com amplitude decrescente podendo alcançar um estado quasi-estacionário. O tempo necessário para alcançar esse estado pode ser estimado e é da ordem de algumas oscilações, ou seja, bastante curto, daí o termo relaxação violenta, introduzido por Lynden-Bell [3], cuja teoria apresenta algumas incoerências com experimentos. Um exemplo é a relaxação violenta sob ação da gravidade, que não demora muito, depois de algumas oscilações na escala de tempo $(G\bar{\rho})^{-1}$ ela chega ao quase equilíbrio. Outro exemplo é sua

não-transitividade, como foi colocado por Arad e Lynden-Bell [24], além disso, a relaxação violenta quase nunca é completa. As flutuações do potencial gravitacional morrem mais rápido que para o sistema chegar ao estado mais provável, que seria o estado de equilíbrio.

Posteriormente ao trabalho de Lynden Bel [3], impulsionados pelas falhas que nele haviam, foram elaboradas outras teorias de relaxação violenta, a fim de solucionar as falhas que haviam na teoria de Lynden-Bell elaborada em 1967. É possível basicamente dividir essas teorias -as mais relevantes- em dois grupos: um deles é baseado numa aproximação mais fundamental do problema, trabalha com a maximização da entropia, o outro tem um perfil mais heurístico. No primeiro grupo estão as teorias de Lynden-Bell e Nakamura [4], as duas últimas são bastante semelhantes entre si. No segundo grupo estão Shu [5] Stiavelli e Bertin [6], Spergel e Hernquist [7], Tremann e Böhringer [8], Trenti e Bertin [9]. Nenhuma delas se mostrou plenamente satisfatória e a teoria de Lynden-Bel ainda constitui uma boa aproximação em muitas situações.

Todas essas teorias têm como objetivo prever o estado final de um sistema a partir do estado inicial. A dinâmica é descrita de maneira exata pela equação de Vlasov [25]:

$$\partial_t f + v \cdot \partial_r f - \nabla \Phi \cdot \partial_v f = 0, \quad (2.9)$$

onde $f = f(r, v, t)$, a função de densidade de probabilidade (DF) no espaço de fase considerado e $\Phi(r, t)$ o potencial de campo médio:

$$\Phi(r, t) = \int v(r - r') f(p', r', t) dp' dr' \quad (2.10)$$

onde $v(r - r')$ é o potencial de interação entre duas partículas em r e r' . No caso

gravitacional, Φ satisfaz a equação de Poisson:

$$\nabla^2\Phi(r, t) = 4\pi G \int f(r, v, t)d^3v. \quad (2.11)$$

Tanto a teoria de Nakamura como a de Lynden-Bell são incompletas e apresentam inconsistências.

A teoria para relaxação violenta de Lynden-Bell possui características, como por exemplo, uma relaxação incompleta, o que foi constatado inclusive no artigo de origem da teoria de 1967 [3], nesse artigo Lynden Bell leva em conta o aspecto de incompressibilidade do espaço de fase, abraçando uma hipótese ergódica na dinâmica do espaço, que permite, pela maximização da entropia, atingir estados estacionários da equação de Vlasov. Ele discute que numa galáxia cujo campo gravitacional médio não está estável passa pela relaxação e segue para o equilíbrio utilizando para tanto o processo de relaxação, que ele nota ser violento, uma vez que encontra a seguinte equação que o descreve:

$$T_r \approx \frac{3P^*}{8\pi}, \quad (2.12)$$

onde $P^* = 2\pi/n$ e n é a frequência de vibração da galáxia, uma vez que ela a associa com a frequência do oscilador harmônico e a define pela seguinte equação:

$$n = (2\pi G\bar{\rho})^{-1/2}, \quad (2.13)$$

onde $\bar{\rho}$ é a densidade média que é dada por $\bar{\rho} = M/(\frac{4}{3}\pi R_0^3)$. Podemos então estimar a ordem de grandeza do tempo de relaxação.

A fim de corrigir tais falhas, Nakamura, como fizeram também outros, desenvolveu sua teoria de relaxação violenta. A diferença entre as duas teorias reside,

sobretudo, nas suas definições de entropia e na discretização do espaço de fase. Enquanto na de Lynden-Bell o espaço de fase é discretizado considerando elementos de *igual volume*, na teoria de Nakamura a discretização se dá pelo uso de elementos de *massas iguais*. A questão da discretização por *igual volume* versus *massas iguais* reside no fato de que em Lynden-Bell a probabilidade de se encontrar inicialmente uma determinada partícula numa dada célula é proporcional ao volume da tal célula, por outro lado, no trabalho de Nakamura essa proporcionalidade se dá com a massa da célula.

Um problema levantado para ambas as teorias é sua natureza de não-transitividade. Essa falha foi mostrada por Arad e Lynden-Bell [24] no qual eles consideram um sistema gravitante em um estado fora do equilíbrio, com energia inicial E_1 , que relaxa até um primeiro estado s_1 . Então o sistema é perturbado por uma força externa que induz uma variação de energia ΔE . O sistema então sofre uma nova relaxação violenta, desta vez para um estado s_2 com energia E_2 . Considerando o mesmo sistema com as mesmas condições mas com uma energia inicial $E + \Delta E$ que relaxa apenas uma vez para um estado s_3 , temos duas maneiras distintas de descrever os processos de relaxação.

A não-transitividade nas teorias de Lynden-Bell e Nakamura são resultado do *phase mixing*. Como a função *grão-fino* de densidade do espaço de fase considera filamentos que se tornam cada vez mais finos o sistema é melhor descrito em termos da densidade *grão-grosso* do espaço de fase, embora seja uma função ainda complicada, assim, a distribuição *grão-fino* nesse caso nos levaria a um resultado equivocado.

Para que as teorias sejam consideradas transitivas é necessário que as duas situações levem ao mesmo estado final, ou seja, que as funções de densidade do espaço de fase f_2 e f_3 sejam iguais. Comparando os estados s_2 e s_3 para um sistema autogravitante, Arad e Lynden-Bell mostraram que eram distintos, o que leva à não-

transitividade tanto da teoria de Lynden-Bell quanto na de Nakamura.. Usando a densidade *grão-fino* do espaço de fase, ambos os caminhos levarão ao mesmo resultado, mas como segundo nossa hipótese o sistema fica tanto tempo em s_1 que consideramos um estado de "equilíbrio", então, a densidade mais adequada para essa descrição é a densidade *grão-grosso* do espaço de fase.

Analisando sob um olhar segundo Boltzmann a não- transitividade é sinal de que a descrição cinética da relaxação violenta é, provavelmente, incompleta assim como o equilíbrio é independente do caminho de evolução do sistema. É necessário, então, uma aproximação dinâmica para encontrar uma equação apropriada da função *grão grosso* de densidade do espaço de fase.

Vamos descrever os principais resultados de Lynden-Bell e de Nakamura.

- Alguns resultados importantes de Lynden-Bell: O sistema em questão está inicialmente fora do equilíbrio com uma energia E e volumes do espaço de fase V_1, V_2, V_3 e assim sucessivamente para os respectivos níveis de densidade do espaço de fase iniciais $\eta_1, \eta_2, \eta_3, \dots$. O espaço de fase é dividido em macrocélulas que por sua vez são divididos em ν microcélulas de volume $\tilde{\omega}$. O estado de uma *microcélula* é chamado *microestado* e o estado de uma *macrocélula* é chamado *macroestado*. Um *macroestado* de um sistema é definido pela matriz n_{iJ} que determina o número de elementos do espaço de fase do tipo J estão dentro de uma *macrocélula* i . A função densidade *grão-grosso* do espaço (DF) de fase é dada por

$$f_i = \frac{1}{\nu} \sum \eta_J n_{iJ}. \quad (2.14)$$

Assumimos a princípio que os sistemas tem iguais probabilidades de estar em qualquer *microestado*. No entanto, para encontrar o estado de equilíbrio,

maximizamos a função $W(n_{iJ})$, que determina o número de microestados correspondentes ao microestado n_{iJ} . Ao maximizar W consideramos apenas os macroestados cuja energia total é E . Pelo método dos multiplicadores de Lagrange chega-se a

$$f_{LB}(r, v) = f_{LB}[\epsilon(r, v)] \equiv A(\epsilon) \sum \eta_J e^{-\beta \eta_J (\epsilon - \mu_J)}, \quad (2.15)$$

em que

$$A(\epsilon) \equiv \frac{1}{1 + \sum_J e^{\beta \eta_J (\epsilon - \mu_J)}}, \quad (2.16)$$

sendo ϵ a energia por massa, $\frac{v^2}{2} + \Phi_{LB}(r)$, onde $\Phi_{LB}(r)$ é o análogo independente do tempo de (2.10) que no caso gravitacional satisfaz (2.11) em que $f(r, v, t)$ é substituída por $f_{LB}(r, v)$. As constantes β, μ_1, μ_2 são multiplicadores de Lagrange provenientes da relação de conservação da energia:

$$\int f_{LB}(r, v) \epsilon(r, v) d^6 \tau = E, \quad (2.17)$$

e da relação de condições iniciais:

$$\int A(\epsilon) e^{-\beta \eta_J (\epsilon - \mu_J)} d^6 \tau = V_J, \quad J = 1, 2, 3, \dots \quad (2.18)$$

onde $d^6 \tau \equiv d^3 r d^3 v$, elemento de volume.

As equações (2.15) - (2.18) são os principais resultados de Lynden-Bell.

É válido também notar que se a distribuição inicial for uniforme, tomamos a função de distribuição da equação (2.15) e chegamos a algo como a distribuição de Fermi-Dirac:

$$f_J(\epsilon) = \frac{\eta_0}{1 + e^{\beta \eta_0 (\epsilon - \mu_J)}}, \quad (2.19)$$

onde ϵ é a energia por partícula, β e μ_J são os multiplicadores de Lagrange provenientes da conservação da energia e das condições iniciais dadas anteriormente.

- Alguns resultados importantes de Nakamura:

Na teoria de Nakamura o resultado mais provável é aquele que maximiza a entropia de Shannon, $S = \sum_i p_i \log p_i$ [26].

Tomamos $f_0(\tau)$ como a densidade inicial do espaço de fase do sistema, em que $\tau \equiv (r, v)$ é a coordenada do espaço de fase.

Definimos a distribuição de probabilidade $p_0(\tau)$ como:

$$p_0(\tau) = \frac{f_0(\tau)}{M}. \quad (2.20)$$

Definimos $p(\tau, t)$ como a distribuição de probabilidade de encontrar uma partícula num tempo $t > 0$. Pela conservação do volume de fase, teremos:

$$p(\tau, t) = \frac{f(\tau, t)}{M}. \quad (2.21)$$

O espaço de fase é dividido em macrocélulas i de volume $\tilde{\omega}$, note a diferença com a teoria de Lynden-Bell, em que ele denota por $\tilde{\omega}$ o volume da microcélula. A probabilidade de grão-grosso é representada por \bar{p}_i , que é a probabilidade de encontrar a partícula na i -ésima macrocélula quando o sistema alcança o equilíbrio, logo:

$$\bar{p}_i = \frac{\bar{f}_i}{M}, \quad (2.22)$$

em que \bar{f}_i é a função de distribuição de grão-grosso da macrocélula i no equilíbrio.

A entropia de Shannon para esse caso é:

$$S_{NK} = - \sum_i \int d^6\tau p_i(\tau) \log p_i(\tau). \quad (2.23)$$

Ao maximizar a entropia de Shannon, encontramos $p_i(\tau)$ mais provável, daí

$$\bar{f}_i = M \int p_i(\tau) d^6\tau. \quad (2.24)$$

Antes de maximizar S_{NK} , escreveremos as restrições nas probabilidades $p_i(\tau)$.

A primeira vem das condições iniciais:

$$\sum_i p_i(\tau) = p_0(\tau) = \frac{f_0(\tau)}{M}. \quad (2.25)$$

A segunda vem da conservação do volume do espaço de fase sob dinâmica sem colisão:

$$M \int d^6\tau \frac{p_i(\tau)}{f_0(\tau)} = \tilde{\omega}. \quad (2.26)$$

O que garante que Nakamura não viola o teorema de Liouville[27].

Da conservação da energia:

$$E = \sum_i \tilde{\omega} \bar{f}_i \left[\frac{v^2}{2} + \frac{G}{2} \sum_j \frac{\tilde{\omega} \bar{f}_j}{|r_i - r_j|} \right]. \quad (2.27)$$

As restrições das condições iniciais e do volume do espaço de fase podem ser escritas em termo da distribuição de probabilidade condicional $k_i(\tau)$, definida como:

$$K_i(\tau) \equiv \frac{p_i(\tau)}{p_0(\tau)} = M \frac{p_i(\tau)}{f_0(\tau)}, \quad (2.28)$$

trata-se da probabilidade de uma partícula que inicialmente estava em τ esteja encerrada na i -ésima célula. Assim:

$$\sum_i K_i(\tau) = 1, \quad (2.29)$$

$$\int d^6\tau K_i(\tau) = \tilde{\omega}. \quad (2.30)$$

Uma vez que a função de distribuição de grão-grosso será:

$$\bar{f}_i = \int f_0(\tau) K_i(\tau) d^6\tau \quad (2.31)$$

Usando a técnica dos multiplicadores de Lagrange,

$$K_i(\tau) = \exp \left[-\beta\epsilon_j - \delta(\tau) - \frac{\lambda_i}{f_0(\tau)} \right], \quad (2.32)$$

onde $\epsilon_i = \frac{v^2}{2} + \Phi(r_i)$ e $\beta, \delta(\tau), \lambda_i$ são multiplicadores de Lagrange das restrições de energia, condições iniciais e preservação do volume, respectivamente.

2.4 Teorema do Limite Central

O Teorema do Limite Central (Central Limit Theorem) é um importante teorema da Física Estatística. O *TLC* é uma formulação muito importante e conveniente da teoria de probabilidade, fornece uma expressão aproximada para a lei de distribuição que governa a soma de um grande número de quantidades aleatórias mutuamente independentes [28].

O *TLC* exerce uma função importante para a física como um todo e, de modo especial, para a física estatística, uma vez que lida com um número extenso de

variáveis N , portanto o limite matemático $N \rightarrow \infty$ é bem coerente e próximo da realidade de nossos sistemas físicos.

Uma distribuição de probabilidade qualquer $p(x)$ leva automaticamente a uma gaussiana, tomemos essa probabilidade com média zero considerando N variáveis x_1, x_2, \dots, x_N , então estabelecemos a probabilidade $P_N(Y)$ de $(x_1 + x_2 + \dots + x_N)/N^{1/2}$ ser igual a Y . Então $P_N(Y)$ é dada pela convolução seguinte: $P_N(Y) = p(x_1) * p(x_2) * \dots * p(x_N)$. Depois de alguns passos, $P_N(Y)$ é dada pela seguinte relação [29]:

$$P_N(Y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \langle x^2 \rangle}} e^{-\frac{Y^2}{2\langle x^2 \rangle} + \frac{1}{N^2} [\dots]}. \quad (2.33)$$

As reticências indicam uma série infinita que dependem de ordens superiores a $p(x)$ com $\langle x^3 \rangle$ e $\langle x^4 \rangle$. É interessante que no limite em que $N \rightarrow \infty$ $P_N(Y)$ torna-se uma distribuição gaussiana:

$$P_\infty(Y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \langle x^2 \rangle}} e^{-\frac{Y^2}{2\langle x^2 \rangle}}. \quad (2.34)$$

O Teorema do Limite Central afirma que a Gaussiana é um atrator sob adição de variáveis aleatórias independentes, identicamente distribuídas. O *TLC* se mantém verdadeiro para variáveis suficientemente fracamente correlacionadas.

Existe uma generalização do Teorema do Limite Central. Foi feita uma demonstração de que para um tipo de correlação especial, denominada *q-independência* a soma das variáveis estocásticas convergem para uma *q-gaussiana* dada pela equação abaixo [1]:

$$G = C \left[1 - (1 - q)\beta \frac{x^2}{2} \right]^{\frac{1}{1-q}}. \quad (2.35)$$

Alguns autores apontam que essa aproximação é muito específica para descre-

ver a riqueza de estados quasi-estacionários em sistemas de interação de longo alcance. No entanto, Hilhorst e Scherhr [30] mostraram que não se tratava de uma q -gaussiana, mas de uma função que se aproximava de uma q -gaussiana. Eles mostraram essa divergência analiticamente uma vez que a soma de variáveis estocásticas correlacionadas resultou em uma não q -gaussiana mas sim em algo próximo disso. Dauxois [31] também contribui com aspectos adicionais para tornar essa aproximação mais aplicável. Rodriguez e alguns colaboradores descreveram um modelo simples com escala invariante em que se aplica o CLT generalizado. Exemplos que satisfaçam essas condições não se obtém tão facilmente.

O modelo HMF - Hamiltoniana de campo médio- possui características interessantes dos sistemas de interações de longo alcance e é amplamente estudado. Baseada em simulações numéricas, a literatura defende que o TLC q -gaussiano generalizado é feito na soma das velocidades das partículas do modelo HMF . Pluchino e colaboradores [32] afirmam que q -Gaussianas são obtidas apenas através de simulações numéricas e nos outros casos são obtidas Gaussianas ou algo entre Gaussianas e q -Gaussianas.

3 Dinâmica do espaço de fase

Para descrever adequadamente os sistemas com interações de longo alcance é necessário fazer uma descrição de sua dinâmica no espaço de fase. O conceito de ergodicidade tem se mostrado fundamental na análise dos processos desses sistemas, em partículas no entendimento das limitações das teorias existentes sobre a relaxação violenta. É importante o uso de argumentos bem estabelecidos quanto ao equilíbrio do sistema e a mecânica estatística que o descreve. Trabalharemos, então, com o teorema de Liouville [27], o qual, entre outras propriedades, conserva o volume do espaço de fase. Utilizamos o ensemble microcanônico, por motivos que ficarão mais claros adiante.

3.1 Teorema de Liouville

Para chegar ao teorema de Liouville começamos pelas equações básicas da mecânica clássica. Trata-se de um teorema base para a teoria cinética clássica. Sistemas de partículas que obedecem às leis de Newton sem dissipação podem ser descritos pelas equações de Hamilton, ou seja, são sistemas de dinâmica Hamiltoniana, caracterizados, entre outros fatores, pela conservação de sua energia. As equações de movimento derivadas da Hamiltoniana são então:

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad (3.1)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \quad (3.2)$$

Com

$$H(p, q) = \sum_{\alpha=1}^N \frac{p_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + V(q_1, \dots, q_{3N}), \quad (3.3)$$

onde m_{α} é a massa da partícula α , p_{α} e q_{α} são seus momentos e coordenadas, respectivamente e V é a energia potencial total do sistema.

As equações de movimento são assim escritas como:

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p_{\alpha}}{m_{\alpha}} \quad (3.4)$$

e

$$\dot{p}_{\alpha} = -\frac{\partial H}{\partial q_{\alpha}} = -\frac{\partial V}{\partial q_{\alpha}} = f_{\alpha}(q_1, \dots, q_{3N}) \quad (3.5)$$

na qual f_{α} é a força atuante na partícula α .

Além da característica de conservação de energia, sistemas Hamiltonianos possuem outras propriedades importantes, uma delas é descrita pelo teorema de Liouville.

A densidade de probabilidade do espaço de fase ρ é conservada e satisfaz a equação de continuidade. De fato, temos que:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\sum_{\alpha=1}^{3N} \left[\frac{\partial(\rho \dot{q})}{\partial q} + \frac{\partial(\rho \dot{p})}{\partial p} \right] = -\sum_{\alpha=1}^{3N} \left[\frac{\partial \rho}{\partial q} \dot{q} + \rho \frac{\partial \dot{q}}{\partial q} + \frac{\partial \rho}{\partial p} \dot{p} + \rho \frac{\partial \dot{p}}{\partial p} \right] \quad (3.6)$$

Usando as equações de Hamilton chegamos a:

$$\frac{\partial \dot{q}}{\partial q} = \frac{\partial(\partial H/\partial q)}{\partial q} = \frac{\partial^2 H}{\partial p \partial q} = \frac{\partial^2 H}{\partial q \partial p}, \quad (3.7)$$

e

$$\frac{\partial \dot{q}}{\partial q} = \frac{\partial(\partial H/\partial q)}{\partial p} = -\frac{\partial \dot{p}}{\partial p}. \quad (3.8)$$

Obtemos finalmente a equação de Liouville:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{\alpha=1}^{3N} \frac{\partial \rho}{\partial q} \dot{q} + \frac{\partial \rho}{\partial p} \dot{p} = 0, \quad (3.9)$$

onde utilizamos $\dot{\rho} = \frac{d\rho}{dt} = 0$.

Podemos também demonstrar o teorema de Liouville pelo caminho utilizado no livro [33]. Definimos o volume V_D de uma região $D \in R^{2n}$ no espaço de fase como:

$$V_D = \int_D d^{2n}\omega. \quad (3.10)$$

É feita, então, a transformação canônica $\omega \rightarrow \omega'$ que transforma D em D' . O volume V'_D será, então:

$$V'_D = \int_{D'} d^{2n}\omega = \int_D |J| d^{2n}\omega, \quad (3.11)$$

onde J é o Jacobiano da transformação e $J^2 = 1$. Logo,

$$J = \pm 1, \quad (3.12)$$

para uma transformação canônica qualquer. Substituindo (3.12) em (3.11) obtemos:

$$V_D = V'_D, \quad (3.13)$$

que é o teorema de Liouville. Portanto, o volume de uma região qualquer do espaço de fase é invariante por uma transformação canônica, e em particular para a evolução temporal do sistema.

3.2 Ergodicidade

Boltzmann construiu uma hipótese especial de ergodicidade segundo a qual deixando um sistema em evolução livre por um tempo suficientemente longo ele passa por todos os estados compatíveis com suas condições gerais, para um determinado valor de energia [34], no entanto nas décadas de 1970 e 1980 diferentes hipóteses de ergodicidade foram utilizadas por diversos autores [35]. A hipótese ergódica apresentou papel fundamental no trabalho de Gibbs de 1902 e para o uso do método de ensembles estatísticos. Com o trabalho de Gibbs e o subsequente de P. e T. Ehrenfest [36] a hipótese ergódica ganhou posição central na mecânica estatística, no entanto, em 1913 M. Plancherel e A. Rosenthal [37] provaram que uma trajetória sob a hipótese de ergodicidade que varre todo o espaço de fase, passando por qualquer ponto desse espaço não poderia ser classificada como uma trajetória mecânica. Na década de 1930 foi desenvolvida a denominada teoria ergódica, sobretudo através do teorema de ergodicidade estabelecido por Birkhoff, a fim de solucionar o problema ergódico, em que se estabelecia que o tempo médio que um sistema passa em uma região do espaço de fase é proporcional à medida dessa região, Birkhoff [38] trouxe ainda nessa década uma ideia nova acerca da ergodicidade, ele propôs que os resultados do problema ergódico podem ser provados sem o uso da hipótese ergódica, mostrando a igualdade entre as médias no espaço de fase e as médias em um intervalo de tempo infinito usando apenas propriedades dinâmicas do sistema e

suposições de sua teoria de ergodicidade.

Definimos um fluxo no espaço de fase por uma transformação, na qual todo ponto x é transformado em outro ponto x_t pelo operador $T(t)$:

$$x \rightarrow x_t = T(t)x. \quad (3.14)$$

Uma função dinâmica $b(x)$ no espaço de fase se transforma da seguinte maneira:

$$b(x) \rightarrow Tb(x) \equiv b(x_t) = b(T(t)x). \quad (3.15)$$

As transformações $T(t)$ em x formam um grupo [39]. Pode-se considerar fluxos mais gerais, não necessariamente descritos por uma Hamiltoniana. No entanto, sempre se mantém uma característica que é comum aos sistemas hamiltonianos: a existência de medidas preservadas. Desde os trabalhos pioneiros na área, como o de Birkoff [38] na década de 1930 essa temática tem sido desenvolvida com um campo da matemática, incluindo teoria espectral, análise funcional e topologia. Recebendo a denominação *teoria ergódica* ou *dinâmica geral* [39].

Para um fluxo geral, a ergodicidade corresponde intuitivamente à situação em que a trajetória de um ponto arbitrário, após um tempo suficientemente longo, passa arbitrariamente de qualquer outro ponto que satisfaz os vínculos sobre o sistema (com o valor constante da energia). Uma região do espaço de fase mantém sua medida constante ao longo do tempo.

Vamos analisar melhor o movimento ergódico matematicamente. Nesse movimento a trajetória de um ponto qualquer cruza infinitas vezes um dado domínio ($t \rightarrow \infty$). Consideramos uma função dinâmica $b(x)$ integrável no espaço de fase considerado:

$$\int d\mu_0 |b(x)| < \infty, \quad (3.16)$$

onde μ_0 é uma medida invariante nesse espaço.

Usando a definição de limite e integrando a função $b(x)$ no intervalo de integração de um tempo inicial t_0 a um tempo final t_f é razoável termos a média temporal de $b(x)$:

$$\lim_{t_f \rightarrow \infty} \frac{1}{t_f - t_0} \int_{t_0}^{t_f} dt b(x_t) = \bar{b}(x). \quad (3.17)$$

O tempo de integração é finito independentemente do limite inferior de integração, o que foi provado por Birkhoff [38]. Esse teorema de Birkhoff vale para toda função $b(x_t)$ como descrita exceto para para um conjunto de medida zero.

Outro teorema formulado em 1931 e considerado uma das bases da Mecânica Estatística de equilíbrio é o Teorema de Ergodicidade[38]:

$$\bar{b}(x) = \langle b(x) \rangle = \int d\mu_0 b(x), \quad (3.18)$$

que estabelece que a média temporal é igual à média no espaço de fase, do qual concluímos que $\bar{b}(x)$ independe da condição inicial.

Vemos então que em um sistema ergódico as médias temporais são iguais as médias microcanônicas. No entanto não é correto afirmar que a distribuição da média dos momentos de cada partícula e a distribuição reduzida do momento são as mesmas [1]. Outra consequência de definir ergodicidade é estabelecer que num sistema dotado por essa características a média das medidas do movimento randômico de uma partícula individual é igual à média do ensemble [12]. No movimento ergódico um determinado ponto inicial possui uma trajetória que passa por um dado

domínio do espaço de fase inúmeras vezes em um longo intervalo de tempo, passando arbitrariamente próximo de todos os estados acessíveis, sempre para tempos suficientemente longos.

Além da ergodicidade existe outra questão a ser discutida, o *phase mixing*, que, basicamente falando, trata-se do quanto o espaço de fase se "misturou", "mesclou" ao longo da evolução temporal. O *phase mixing* implica certas consequências no movimento e comportamento dos elementos envolvidos. Existem várias possibilidades de distorção do elemento de fase com relação à sua forma inicial. A trajetória de cada ponto evolui de maneira divergente com relação a pontos inicialmente próximos, divergindo exponencialmente ao longo do tempo. [39].

Uma das explicações dadas de porque as teorias sobre relaxação violenta falham é que o estado quasi-estacionário é alcançado antes de uma mistura de fase completa, correspondendo ao que se denomina mistura incompleta ("phase mixing"). Um dos objetivos da presente dissertação é justamente mostrar a relaxação entre a mistura incompleta e a quebra de ergodicidade.

Dos exemplos, galáxias não sofrem *phase mixing* completo pois apresentam distinções com relação às suas partes externas e constantemente novas estrelas se formam. Essa característica é muito importante na interpretação de observações.

Cabe notar também que ao longo da evolução a densidade de grão fino permanece a mesma, enquanto a densidade de grão-grosso evolui para um estado estacionário [40]. Uma analogia pode ser feita tomando um copo com 30% de tequila e 70% de suco de tangerina, é de se esperar que todo elemento de volume finito no copo conterà essas mesmas proporções (30% e 70% de tequila e suco de tangerina, respectivamente), enquanto que se tomarmos elementos de volume infinitesimais poderemos encontrá-los com 100% de tequila ou 100% de suco de tangerina (e.g. Arnold e Avez [41]).

Vamos agora à outro ponto fundamental para a nossa análise o que foi estabelecido por Birkhoff. Ele mostrou que para o teorema da ergodicidade ser verdadeiro o espaço de fase deve ser metricamente indecomponível, ou em outras palavras que o espaço é metricamente transitivo. O espaço de fase não pode ser dividido em duas regiões invariantes pela dinâmica, com medidas diferentes de zero ou de um. O que quer dizer, então, que todo subespaço invariante do espaço de fase tem medida zero ou um. Essas observações deixam claro que para um sistema Hamiltoniano o fluxo não é ergódico no espaço de fase como um todo, mas apenas (se for o caso), sobre a superfície de energia constante, ou na variedade definida por quaisquer outras grandezas conservadas.

É importante considerarmos o *fluxo de mixing*. Consideramos duas regiões do espaço de fase, A e B , num tempo inicial 0 com medidas $\mu_0(A)$ e $\mu_0(B)$. Na evolução temporal mantemos B fixo e A evolui, num dado tempo t para o espaço A_t . Sendo um fluxo com mixing a região A se espalhará pelo espaço de fase, e, possivelmente pode se superpor a B , com intersecção $A_t \cap B$. Podemos estabelecer, então, uma comparação entre as medidas dessas regiões. A medida $\mu_0(A_t \cap B)$ da região de intersecção, está para a medida $\mu_0(B)$ da região B assim como a medida $\mu_0(A_t)$ da região está para a medida do espaço completo, que por definição é 1. A medida do fluxo sendo preservada, $\mu_0(A_t) = \mu_0(A)$, podemos escrever que:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\mu_0(A_t \cap B)}{\mu_0(B)} = \mu_0(A). \quad (3.19)$$

Dessa forma a propriedade do *mixing* implica em ergodicidade. Sendo A_t um subconjunto invariante do espaço de fase, $A_t = A$ e $A_t \cap A = A \cap A = A$, temos então:

$$\mu_0(A_t \cap A) = \mu_0(A). \quad (3.20)$$

E, da equação (3.15), fazendo $B=A$, chegamos a:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mu_0(A_t \cap A) = [\mu_0(A)]^2. \quad (3.21)$$

sendo assim, temos duas soluções para $\mu_0(A)$, zero e 1. O fluxo é metricamente transitivo e, conseqüentemente ergódico. Porém o inverso não é verdade, ergodicidade não implica necessariamente mixing.

A propriedade de ergodicidade, embora há algum tempo estabelecido (o artigo de Birkhoff[38] datando de 1931), não havia sido comprovado experimentalmente até que recentemente a comprovação foi obtida por Feil *et al* na referência [12] para a difusão de partículas em um líquido. Trata-se de uma prova experimental na qual foram medidas as características difusivas das moléculas dentro de um vidro poroso nanoestruturado. Os resultados foram obtidos por dois métodos, o primeiro observando o comportamento difusivo de uma partícula única e também para um ensemble de partículas usando técnicas de campo pulsado. Nesse experimento, a ergodicidade foi observada mostrando a igualdade entre os resultados de medidas temporais para uma única partícula e para uma média de ensemble de partículas.

4 Métodos utilizados nas simulações computacionais

Para a realização das análises dos sistemas com interações de longo alcance tratadas nesse trabalho utilizamos simulações computacionais de dinâmica molecular. Utilizamos métodos diferentes para as simulações em sistemas bidimensionais e em sistemas tridimensionais, adequados a cada um dos casos.

Para os sistemas bidimensionais usamos o método de integração simplética. Já para os sistemas tridimensionais usamos o programa baseado no método desenvolvido por Aarseth com certas modificações, baseado no método de Hermite [11]. Cada um será descrito adiante.

4.1 Integrador Simplético

Várias propostas de integradores simpléticos existem na literatura [14]. Algoritmo de integração simplética de ordens 6 e 8 são aplicadas para integração de trajetórias clássicas. Considerando o comportamento estocástico nessas trajetórias os integradores de ordem 8 são bastante eficazes. Os operadores simpléticos para sexta e oitava ordens são obtidos com alguns passos relativamente simples, com certos coeficientes obtidos da solução numérica de equações algébricas. No presente contexto utilizamos um integrador de quarta ordem que é utilizado em vários trabalhos [13]. O algoritmo utilizado neste trabalho é descrito no apêndice (A).

Para sistemas Hamiltonianos a ideia é construir integradores simpléticos de alta ordem explícitos e reversíveis temporalmente. Existe, ao menos, um integrador simplético com coeficientes exatos para qualquer ordem. O integrador mais simples, desenvolvido por Forest [42] e Neri [43] é o de quarta ordem.

Objetivamente falando, integradores simpléticos são esquemas de integração numérica para sistemas Hamiltonianos. Conservam a forma de $dp \wedge dq$ no espaço de fase exatamente, o que significa que $(q(0), p(0)) \rightarrow (q(\tau), p(\tau))$ é uma transformação canônica. Consequentemente não há alteração secular no erro da energia total. Para integradores não simpléticos o erro da energia total cresce secularmente.

Neri [43] desenvolveu uma maneira geral de construir o integrador simplético explícito para uma Hamiltoniana $H = T(p) + V(q)$. Apesar de ser muito complicado aplicar a construção de Neri para integradores de sexta e oitava ordem, ele se aplica facilmente a integradores de quarta ordem.

Para obter um integrador simplético de uma ordem desejada consideram dois operadores não-comutativos A e B , além de um passo de tempo pequeno τ . Então, para um dado número inteiro n , a ordem do integrador, existem os conjuntos de números reais (c_1, c_2, \dots, c_k) e (d_1, d_2, \dots, d_k) tais que a diferença entre a função exponencial $e^{\tau(A+B)}$ e o produto das funções exponenciais $e^{(c_1\tau A)}e^{(d_1\tau B)}e^{(c_2\tau A)}e^{(d_2\tau B)} \times \dots \times e^{(c_k\tau A)}e^{(d_k\tau B)}$ é da ordem de τ^{n+1} , assim:

$$e^{\tau(A+B)} = \prod_{i=1}^k e^{(c_i\tau A)}e^{(d_i\tau B)} + o(\tau^{n+1}). \quad (4.1)$$

Para $n = 1$, por exemplo, temos a solução trivial $c_1 = d_1 = 1$, com $k = 1$:

$$e^{\tau(A+B)} = e^{(c_1\tau A)}e^{(d_1\tau B)} + o(\tau^2). \quad (4.2)$$

Embora este seja um problema um tanto quanto geral ele é tem ampla aplicação, é diretamente relacionado ao integrador simplético de sistemas Hamiltonianos [43].

Aplicando a equação (4.1) ao operador de evolução temporal $e^{\{H,\cdot\}}$ com $H = T + V$, podemos obter o integrador simplético da ordem desejada.

Usando a notação $z = (p, q)$, temos a equação Hamiltoniana escrita da forma:

$$\dot{z} = \{z, H(z)\}, \quad (4.3)$$

onde as chaves são parênteses de Poisson ($F, G = F_q G_p - F_p G_q$). Se introduzirmos um operador diferencial D_G em $D_G F = \{F, G\}$ a equação (4.3) passa a ser $\dot{z} D_H z$, então a solução formal para $z(t)$ de $t = 0$ para $t = \tau$ é dada por

$$z(t) = e^{\tau D_H} z(0), \quad (4.4)$$

para a Hamiltoniana dada $D_H = D_T + D_V$. Tomando $A = D_T$ e $B = D_V$, teremos:

$$z(t) = e^{\tau(A+B)} z(0). \quad (4.5)$$

Supomos o conjunto de números reais $(c_i, d_i), i = (1, 2, \dots, k)$ que satisfazem a equação (4.1) para um dado n inteiro. Consideramos a descrição de $z = z(0)$ a $z' = z(\tau)$, que é dado por:

$$z' = \left(\prod_{i=1}^k e^{(c_i \tau A)} e^{(d_i \tau B)} \right) z. \quad (4.6)$$

Essa descrição é dita simplética porque é simplesmente o produto de descrições simpléticas elementares e se aproxima da solução exata (4.5) para ordens acima de $o(\tau^n)$. A equação (4.6) é explicitamente computável. Ela nos dá a sucessão de

descrições:

$$q_i = q_{i-1} + \tau c_i \frac{\partial T}{\partial p}(p_i - 1), \quad (4.7)$$

$$p_i = p_{i-1} + \tau d_i \frac{\partial T}{\partial q}(q_i - 1), \quad (4.8)$$

para $i = l$ até $i = k$, temos $(q_0, p_0) = z$ e $(q_k, p_k) = z'$, um integrador simplético da *enésima* ordem é deste modo obtido. Para um abordagem direta do problema, devemos expandir o lado esquerdo da equação (2.1) em potências de τ e igualar com os coeficientes de iguais potências de τ para ordens superiores a τ^n . Obtemos um conjunto de equações algébricas não-lineares para c_i e d_i desconhecidos. Por exemplo, para $n=1$ (integrador de primeira ordem) temos as seguintes relações para os coeficientes de A e B , portanto:

$$c_1 + c_2 + \dots c_k = 1, \quad (4.9)$$

$$d_1 + d_2 + \dots d_k = 1, \quad (4.10)$$

portanto, a solução mais simples neste caso para $k = 1$ é $c_1 = d_1 = 1$. Para ordens superiores pode ficar mais complicado, mas de modo geral, podemos escrever a equação (2.1) da seguinte forma:

$$S(\tau) = \prod_i = e^{(c_i \tau A)} e^{(d_i \tau B)} = e^{([\tau(A+B) + o(\tau^{n+1})])}. \quad (4.11)$$

O integrador simplético de quarta ordem é obtido pela repetição simétrica (produto) de operadores de segunda ordem na forma:

$$S_4(\tau) = S_2(x_1\tau)S_2(x_0\tau)S_2(x_1\tau), \quad (4.12)$$

onde x_0 e x_1 são valores reais a serem determinados. Utilizando (4.11) e após alguns cálculos, chegamos a:

$$x_0 = \frac{-2^{1/3}}{2 - 2^{1/3}} \quad (4.13)$$

e

$$x_1 = \frac{1}{2 - 2^{1/3}} \quad (4.14)$$

Ao comparar (4.12) com (4.11) obtemos as seguintes relações para os coeficientes:

$$d_1 = d_3 = x_1, \quad (4.15)$$

$$d_2 = x_0, \quad (4.16)$$

$$c_1 = c_4 = \frac{x_1}{2} \quad (4.17)$$

e

$$c_2 = c_3 = \frac{(x_0 + x_1)}{2} \quad (4.18)$$

Com os valores de (4.13) e (4.14) é possível determinar (4.12) exatamente como o integrador simplético de quarta ordem.

O programa do integrador simplético foi desenvolvido na linguagem Fortran e utilizado na forma obtida por Yoshida [14].

4.2 O Problema do integrador de Hermite

O programa que utilizamos para N corpos gravitantes em três dimensões foi desenvolvido por Sverre J. Aarseth com algumas modificações e escrito em Fortran [11], cujo programa original é descrito no apêndice (A).

O tempo de cálculo do programa cresce com N^2 , uma vez que a força de cada um dos corpos N é determinada pela soma das forças dos outros $N - 1$ corpos. É importante também salientar que cada partícula é descrita segundo seu próprio intervalo de tempo (passo de tempo) Δt , recurso fundamental diante da ampla gama de escalas de tempo em um sistema estelar.

Nessa simulação tomamos G unitária. As variáveis de entrada são, primeiramente N que, como já mencionado, é o número de partículas do sistema; o intervalo de tempo δt para saída dos dados; parâmetro η ligado ao erro; o tempo de integração t_{crit} ; massas m_i ; posição inicial x_i e velocidades \dot{x}_i , com i no intervalo de 1 a N . O passo de tempo Δt de cada partícula estabelece a seguinte relação com a força:

$$\Delta t = \left(\frac{\eta F}{\ddot{F}} \right)^{1/2}, \quad (4.19)$$

após cada intervalo de saída δt o programa escreve no arquivo de saída a massa, o passo de tempo Δt , posição, velocidade de cada corpo, além de escrever a energia e o número de passos acumulados.

O programa de Aarseth é dado no apêndice do livro [11]. Ele utiliza o método de integração de Hermite, o qual se utiliza da expansão da série de Taylor das coordenadas e velocidades até quarta ordem no intervalo de tempo Δt da seguinte maneira:

$$x_1 = x_0 + v_0 \Delta t + \frac{a}{2} (\Delta t)^2 + \frac{\dot{a}}{6} (\Delta t)^3 + \frac{a^{(2)}}{24} (\Delta t)^4 + \alpha \frac{a^{(3)}}{120} (\Delta t)^5, \quad (4.20)$$

$$v_1 = v_0 + a_0 \Delta t + \frac{\dot{a}}{2} (\Delta t)^2 + \frac{a^{(2)}}{6} (\Delta t)^3 + \frac{a^{(3)}}{24} (\Delta t)^4, \quad (4.21)$$

onde a é a aceleração e α é uma constante a ser ajustada. O método de Newmark de ordem superiores implícitas tem a forma [13]:

$$x_1 = x_0 + \frac{1}{2} (v_0 + v_1) \Delta t - \frac{\alpha}{10} (a_1 - a_0) (\Delta t)^2 + \frac{6\alpha - 5}{120} (a_1 + a_0) (\Delta t)^3, \quad (4.22)$$

$$v_1 = v_0 + \frac{1}{2} (a_1 + a_0) \Delta t - \frac{1}{12} (\dot{a}_1 - \dot{a}_0) \Delta t^2, \quad (4.23)$$

que pode ser facilmente verificado substituindo v_1 da equação (4.23) na equação (4.22), onde os índices 0 e 1 podem ser permutados, uma vez que se trata de uma formulação simétrica no tempo e consistente com Hermite [13].

5 Interações de longo alcance em sistemas bidimensionais

Para as simulações de sistemas autogravitantes em duas dimensões utilizamos um programa com integrador simplético, já introduzido nesse trabalho. No caso usamos o método de integração simplética de quarta ordem desenvolvido por H. Yoshida [14].

Foram feitas simulações para o caso do anel com raio menor $R_1 = 40.0$ e $R_2 = 50.0$ e para o caso circular com raio menor $R_1 = 0.0$. Medidas fora desses limites iniciais são nulas.

5.1 O modelo bidimensional

Consideramos um sistema clássico Hamiltoniano com N partículas em duas dimensões com potencial de longo alcance inter-partícula. Tomamos que os corpos envolvidos são idênticos e possuem massa unitária [44]. A dinâmica de cada partícula é governada pela Hamiltoniana $H = T + V$, onde a energia cinética é dada por:

$$T = \sum_{i=1}^N \frac{(p_{x,i}^2 + p_{y,i}^2)}{2} \quad (5.1)$$

onde $(p_{x,i}, p_{y,i})$ são os momentos conjugados.

O potencial V pertence à classe de potenciais periódicos bidimensionais:

$$V_s = \sum_i^N V_s(r_i), \quad (5.2)$$

com

$$V_s = \frac{1}{4N} \sum_{j=1}^N \sum_{0 < k^2 \leq s} c(k) [1 - \cos(k \cdot (r - r_j))], \quad (5.3)$$

onde s é o parâmetro que determina o número de harmônicos inclusos na expansão de Fourier de V , $r = (x, y)$, $k = (n_x, n_y)$ é o vetor de onda, sendo n_x e n_y números inteiros, $c(k) = c(-k)$ é uma função de valor real do módulo de k , que fixa a intensidade de acoplamento do harmônico k . Para nosso modelo de potencial autogravitante, para o limite $s \rightarrow \infty$ e $c(k) = 1/k^2$ temos o seguinte potencial [45]:

$$V_\infty(r) \propto \sum_{i=1}^N \log|r - r_j|, \quad (5.4)$$

uma vez que é considerada a reescala de tempo t/\sqrt{N} .

5.2 Escolha das condições iniciais

As condições iniciais foram definidas após alguns testes. Primeiro surge a questão do número N de partículas, quanto maior seu número melhores são os resultados obtidos, no entanto o tempo de execução do programa também cresce, assim como o tempo de vida do estado quasi-estacionário o que pode, de acordo com o número de partículas, levar um tempo excessivamente longo. Efetuamos testes com diversos valores para N , percebemos que a partir de $N = 1000$ os dados obtidos já apresentam boa qualidade estatística. A simulação que usamos aqui para fins de análise foi feita para $N = 2000$. Com um erro máximo admitido para a energia de 10^{-3} ,

um intervalo de tempo para que os dados sejam salvos de $5 \cdot 10^{-3}$ e tempo final de contagem 10^4 . O tempo final de contagem permite que o sistema atinja o equilíbrio.

Os gráficos da força na figura (1) foram feitos apenas para observar o comportamento de modo geral do sistema e percebemos que a mudança do raio interno R_1 não provoca nenhuma mudança significativa no comportamento qualitativo do sistema, ou seja, tanto para o caso do anel, quanto para o caso circular ($R_1 = 0$).

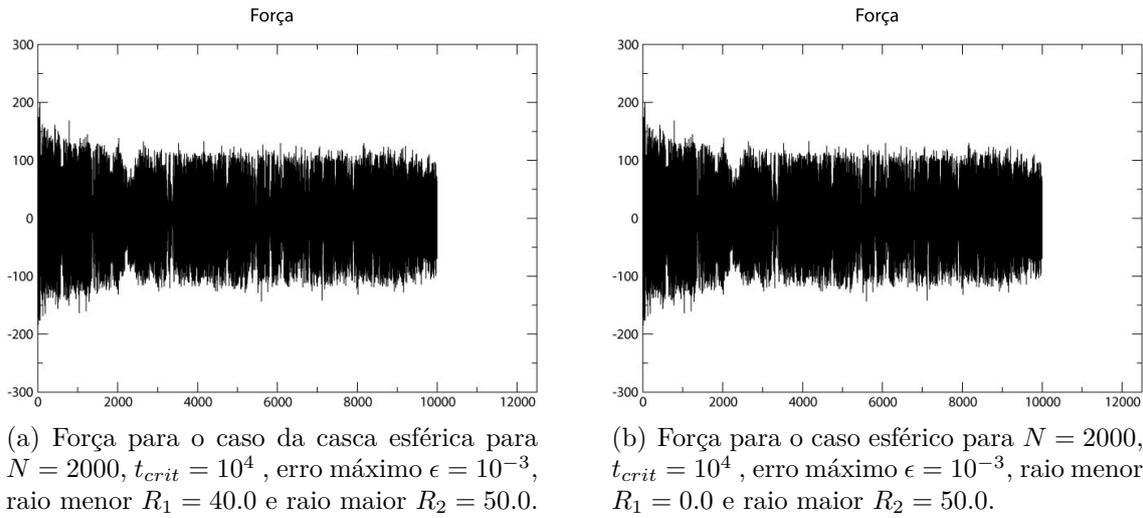


Figura 1: Gráficos da Força para os casos do anel e caso circular para um sistema bidimensional.

5.3 Convergência para a Gaussiana

O teorema do limite central estabelece que a soma de n variáveis estocásticas independentes com desvio padrão finito converge para uma distribuição gaussiana. Sendo assim, vamos considerar a média temporal \bar{p}_k do momento da partícula k na direção x (ou equivalentemente y) calculada a intervalos de tempo fixo Δt_S :

$$\bar{p}_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n p_k(i\Delta t_S). \quad (5.5)$$

Quanto maior Δt_S , menor a correlação entre os momentos em $i\Delta t_S$ e $(i+1)\Delta t_S$,

embora a correlação esteja sempre presente. Apesar disso, a distribuição de P_k tende muito lentamente, mais lentamente do que para variáveis não-correlacionadas. Para mostrar isso calculamos os momentos estatísticos M_3 e M_4 da variável reduzida y_k [1] dado por:

$$y_k = \frac{1}{\sigma} [\bar{p}_k - \mu], \quad (5.6)$$

onde σ é o desvio padrão de \bar{p}_k :

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \bar{p}_k^2}, \quad (5.7)$$

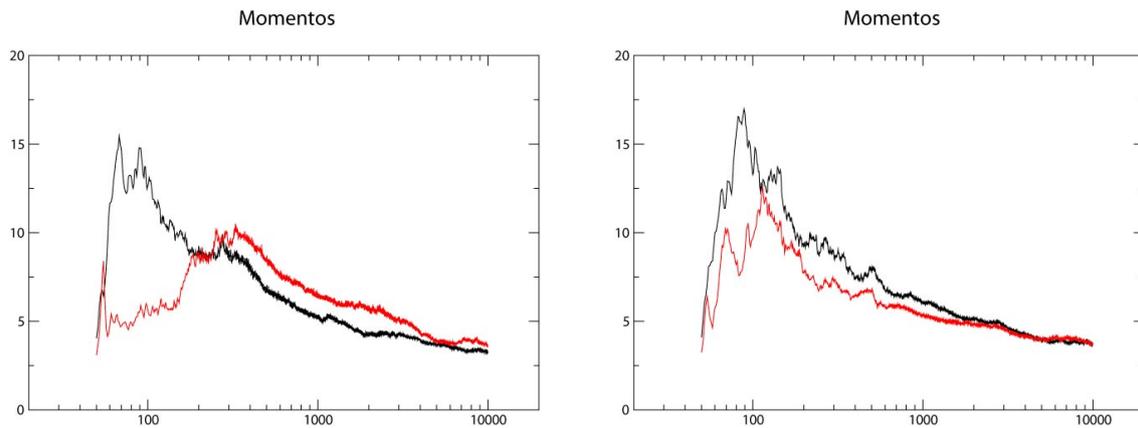
e μ é dado pela seguinte equação:

$$\mu = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \bar{p}_k, \quad (5.8)$$

Os momentos estatísticos da variável \bar{y}_k são então definidos por:

$$M_l = \langle |y_k|^l \rangle \quad (5.9)$$

Os valores de referência para os momentos M_3 e M_4 da variável reduzida \bar{y}_k com distribuição Gaussiana são 1.5958 e 3 respectivamente. Os gráficos na figura (2) mostram o comportamento de M_4 (componentes x e y) para duas condições iniciais distintas. No caso esférico temos uma tendência mais razoável para os valores de referência e portanto, se aproxima mais da gaussiana que no caso da casca esférica (tomando como referência, é claro, o gráfico com o mesmo $\Delta t_S = 10.0$).



(a) Gráficos de \bar{y}_k para as componentes x e y para o caso do anel para $N = 2000$, $t_{crit} = 10^4$, erro máximo $\epsilon = 10^{-3}$, raio menor $R_1 = 40.0$ e raio maior $R_2 = 50.0$.

(b) Gráficos de \bar{y}_k para as componentes x e y para o caso circular para $N = 2000$, $t_{crit} = 10^4$, erro máximo $\epsilon = 10^{-3}$, raio menor $R_1 = 0.0$ e raio maior $R_2 = 50.0$.

Figura 2: Gráficos do momento M_3 para os casos de anel e circular para um sistema bidimensional.

Concluimos que de fato, conforme observado no artigo [1] para um sistema bidimensional. A distribuição das velocidades médias tende muito lentamente para uma distribuição gaussiana, apesar das variáveis somadas serem claramente correlacionadas. Para outro exemplo similar em outro contexto vide a referência [1].

5.4 Análise da ergodicidade

Para determinar se e em que condições o sistema é ergódico, consideramos a média sobre grandezas de campo médio calculadas sobre variáveis a uma partícula ao longo do tempo, e as comparamos sobre as médias das mesmas grandezas mas sobre o ensemble de N partículas a um tempo fixo. Se elas se igualarem diremos que o sistema é ergódico. Isso implica, em particular, que a média temporal da velocidade (momento) de uma partícula deve ser igual à média do ensemble e, portanto, nula, ou ainda, que o desvio padrão de \bar{y}_k deve ir a zero depois de um tempo suficientemente

longo a ser determinado.

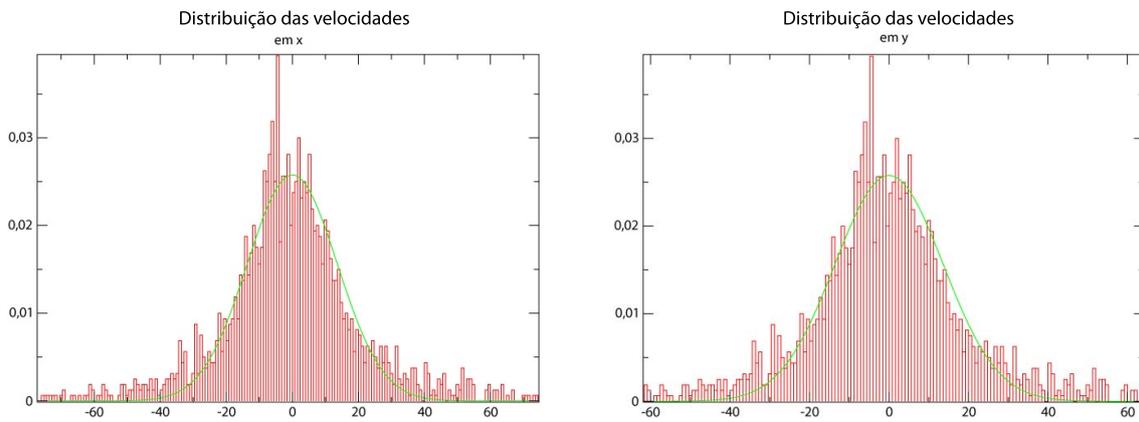
5.4.1 Distribuição das velocidades

Na figura (3) mostramos histogramas das componentes do momento no tempo $t = t_{crit}$ e observamos uma distribuição que tende à gaussiana:

$$p(x) = \frac{1}{2\pi\sigma'^2} e^{-(x-\mu)^2/2\sigma'^2}, \quad (5.10)$$

onde μ é a média da variável x e σ' é o seu desvio padrão. Com um ajuste de mínimo quadrado obtivemos ($\mu = 0$) $\sigma' = 2.48$.

Portanto em $t = t_{crit}$ podemos afirmar que o sistema esta no equilíbrio termodinâmico.



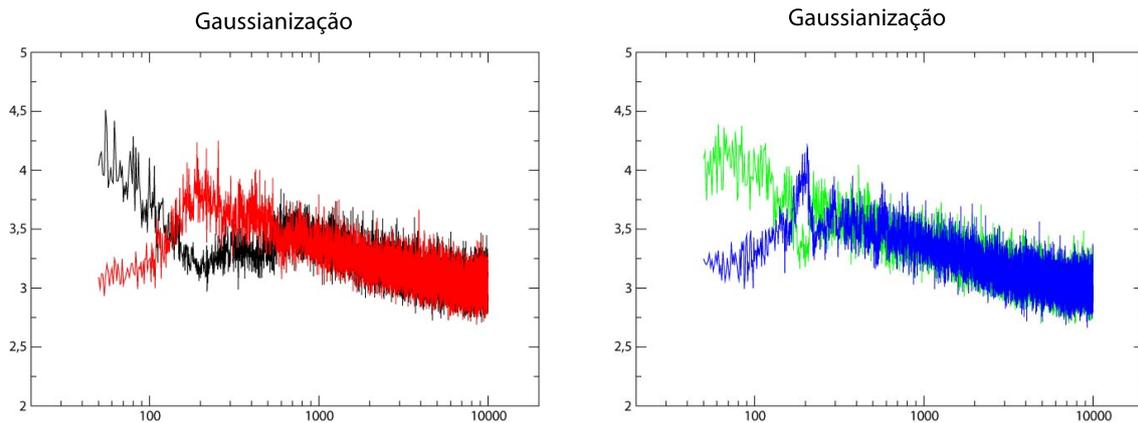
(a) Distribuição das velocidades em x para o caso do anel para $N = 2000$, $t_{crit} = 10^4$, erro máximo $\epsilon = 10^{-3}$, raio menor $R_1 = 40.0$ e raio maior $R_2 = 50.0$.

(b) Distribuição das velocidades em y para o caso circular para $N = 2000$, $t_{crit} = 10^4$, erro máximo $\epsilon = 10^{-3}$, raio menor $R_1 = 40.0$ e raio maior $R_2 = 50.0$.

Figura 3: Distribuição das velocidades em y para os casos do anel e circular em um sistema bidimensional.

5.4.2 Gaussianização

Outra maneira de ver como o sistema tende para o equilíbrio é fazer o gráfico do quarto momento de distribuição reduzida de velocidades em função do tempo, como mostrado na figura (4). Para as duas condições iniciais M_4 se aproxima do valor de equilíbrio 3 para tempo da ordem de 10.000.



(a) Gráfico da gaussianização para o caso do anel para $N = 2000$, $t_{crit} = 10^4$, erro máximo $\epsilon = 10^{-3}$, raio menor $R_1 = 40.0$ e raio maior $R_2 = 50.0$.

(b) Gráfico da gaussianização para o caso circular para $N = 2000$, $t_{crit} = 10^4$, erro máximo $\epsilon = 10^{-3}$, raio menor $R_1 = 0.0$ e raio maior $R_2 = 50.0$.

Figura 4: Gráficos de M_4 para \bar{v}_x e \bar{v}_y (variáveis reduzidas) para os casos de anel e circular para um sistema bidimensional.

5.4.3 Desvio padrão das velocidades

Na figura (5) mostramos o gráfico do desvio padrão σ da variável \bar{y}_k (componente x). É interessante notar que no gráfico σ , o desvio padrão, tende a zero, o que indica o comportamento de um sistema ergódico, uma vez que temos, então o critério de ergodicidade obedecido.

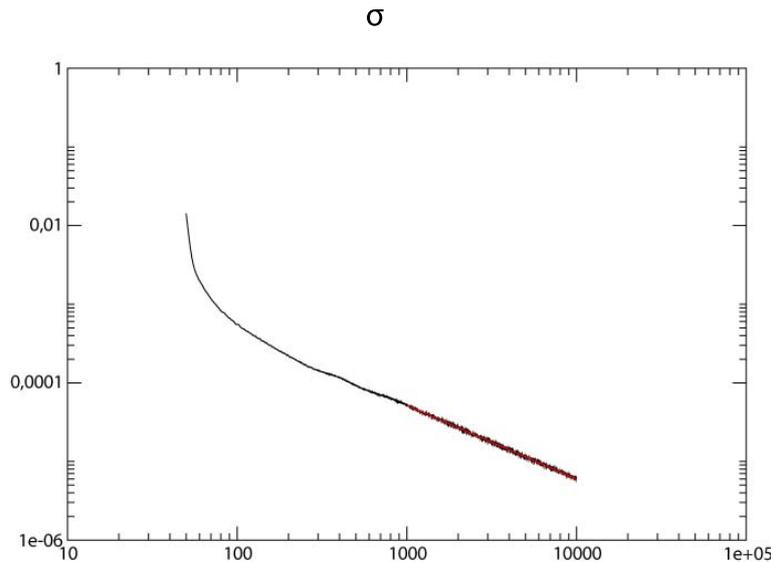


Figura 5: Sigma: Desvio padrão das velocidades para o anel para $N = 2000$, $t_{crit} = 10^4$, erro máximo $\epsilon = 10^{-3}$, raio menor $R_1 = 40.0$ e raio maior $R_2 = 50.0$. Ao se aproximar do equilíbrio obedece à função da forma $y = 0.033341 \cdot x^{-0.936933}$ sob coeficiente de correlação = 0.99982.

Percebemos que o desvio padrão σ de fato tende a zero. A ordem de grandeza do tempo necessária para que σ seja bem próximo de zero é tal que o estado quasi-estacionário relaxa até o equilíbrio termodinâmico final. Isto explica, pelo menos em parte, a falha da teoria de relaxação violenta de Lynden-Bell, que exige um estado de mixing completo.

É possível notar também assim como no artigo [1], σ se aproxima de zero com uma lei de potências, embora não a mesma que a obtida no referido artigo, onde o desvio padrão obedece à lei de potência $t^{-1/2}$. Para nosso caso bidimensional o decaimento foi obtido por um ajuste de mínimo quadrado como $t^{-0.937}$.

6 Interações de longo alcance em sistemas tridimensionais

Esse capítulo aborda as interações de longo alcance através de simulações computacionais.

Essa abordagem nos fornece os resultados que serão aqui analisados. A simulação utilizada é baseada, com adaptações, no programa para N partículas (N-body) elaborado por Sverre J. Aarseth, o qual foi mostrado detalhadamente no Apêndice do livro *Galactic Dynamics* [11], e extensamente aplicado em sistemas estelares [13].

6.1 Escolha das condições iniciais

Consideramos aqui um sistema com $N = 2000$ partículas idênticas de massa $m = 1$ e constante gravitacional $G = 1$. Em três dimensões as partículas podem evaporar, a saber, adquirir energia suficiente para deixar o sistema, o que complica bastante a análise com relação ao caso bidimensional. Diversos testes foram feitos para diferentes números de partículas. Tomamos com $\Delta t_S = 0.1, 1.0, 10.0, 100$ tempo crítico t_{crit} de 1000.0, erro máximo na energia admitido de 10^{-3} , intervalo de tempo de saída dos dados 0.1 e um tempo de relaxação inicial antes de somar as variáveis $t_{relax} = 10$ para todas as simulações.

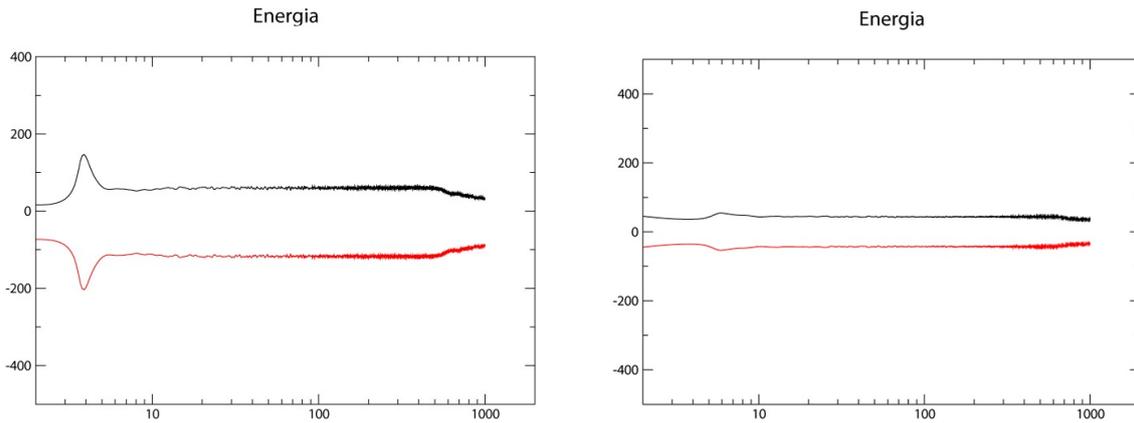
Foram feitas simulações para dois casos: casca esférica, com raio menor $R_1 = 5.0$ e raio maior $R_2 = 6.0$ para $\Delta t_S = 0.1, 1.0, 10.0$ e 100.0; e para a esfera, ou seja,

raio menor $R_1 = 0$ e raio maior $R_2 = 6.0$ para $\Delta t_S = 10.0$, uma vez que foi um dos intervalos entre as somas e os resultados contabilizados que apresentou menor "evaporação" de partículas e, de modo geral, se comportou bem com relação aos parâmetros em análise. Qualquer partícula "evaporada" deixa de ser contabilizada pelo programa, ou seja, o que estiver fora dos limites da simulação tem valor nulo.

Na figura (6) mostramos o comportamento da energia cinética e potencial para o caso da casca esférica e para o caso esférico. Os gráficos descrevem o sistema, inicialmente fora do equilíbrio que evolui violentamente para um estado quasi-estacionário. Notamos que a relaxação violenta se dá de maneira mais sutil no caso esférico em decorrência de sua geometria, percebemos também que a relaxação inicial é muito rápida, pois ela ocorre antes do tempo 10.

Notamos que a relaxação é de fato violenta no que concerne ao tempo, pois ela ocorre antes do tempo 10, onde sai do estado fora do equilíbrio para um estado de quase equilíbrio onde vai permanecer por um bom período, obedecendo ao conceito de relaxação violenta estabelecido por Lynden Bell.

Em seu trabalho de 1967 sobre relaxação violenta [3] Lynden Bell descreve essa distribuição de energia, até então incomum, para o caso de um sistema galáctico.



(a) Energia cinética (preto) e potencial gravitacional (vermelho) para sistema tridimensional para o caso da casca esférica com raio menor $R_1 = 5.0$ e raio maior $R_2 = 6.0$, $N = 2000$ e $\Delta t_S = 10.0$

(b) Energia cinética (preto) e potencial gravitacional (vermelho) para sistema tridimensional para o caso esférico com raio menor $R_1 = 0$ e raio maior $R_2 = 6.0$, $N = 2000$ e $\Delta t_S = 10.0$

Figura 6: Gráfico monolog da energia para 2000 partículas com $\Delta t_S = 10.0$ para o caso da casca esférica e para o caso esférico.

Diferentemente do caso dos sistemas bidimensionais, onde não ha evaporação de partículas em razão de seu potencial confinante, nos sistemas tridimensionais o número de partículas que evaporam pode ser relevante, por esse motivo nosso programa deixa de contabilizar essas partículas. Esse processo pode ser observado nos gráficos da figura (7) que mostram o comportamento das componentes dos momentos:

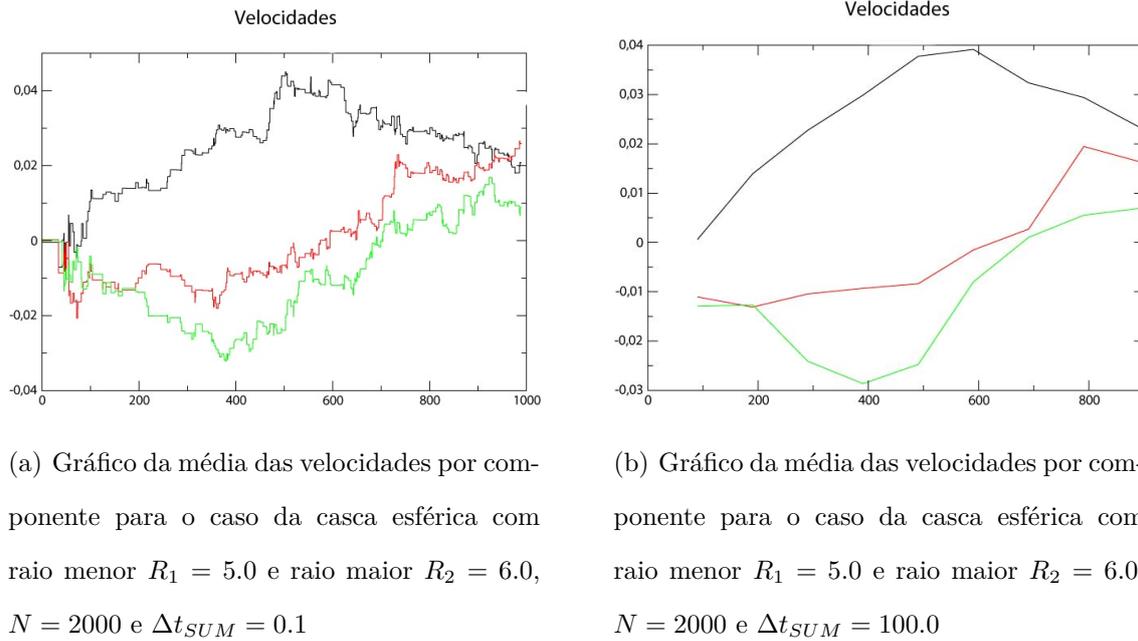
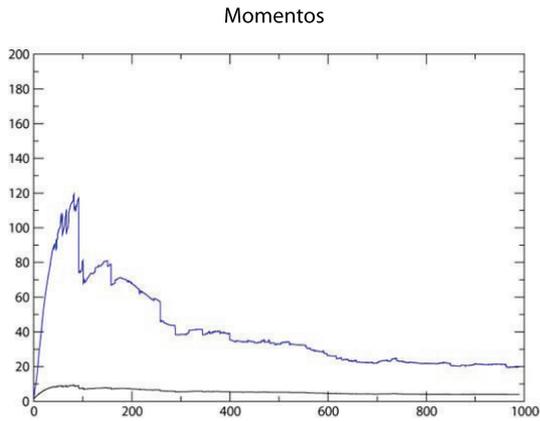


Figura 7: Gráficos das componentes do momento para $N=2000$ partículas com diferentes Δt_S

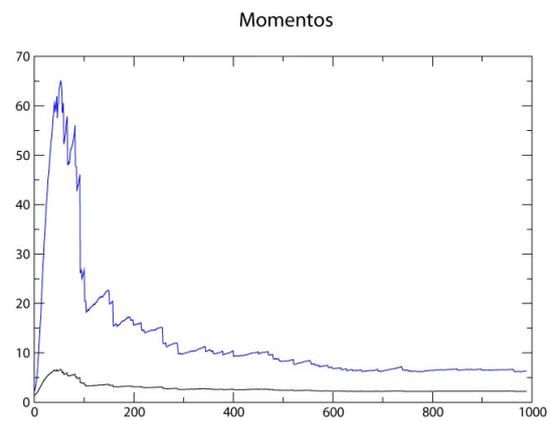
Os picos ou quebras que ocorrem nos gráficos ilustram a "evaporação" de partículas, que vai sendo reduzida à medida que aumentamos o Δt_S .

6.2 Ergodicidade

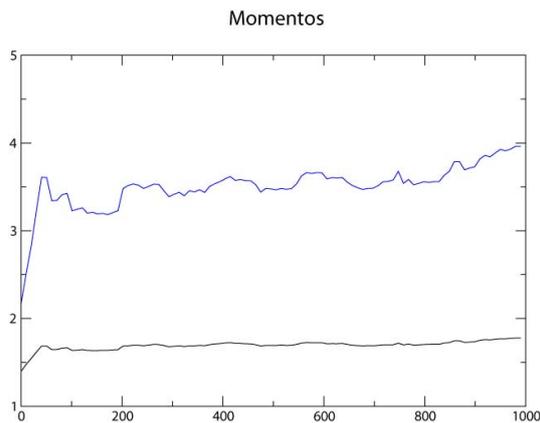
Fazendo uma análise análoga ao caso bidimensional consideramos a media temporal \bar{y}_k de cada componente da velocidade (x, y e z). Os resultados obtidos para os momentos M_3 e M_4 para a componente x apenas estão mostrados na figura (8). Apesar de não tão evidente como no caso anterior, percebemos ainda assim que seus valores tendem para aqueles de uma gaussiana.



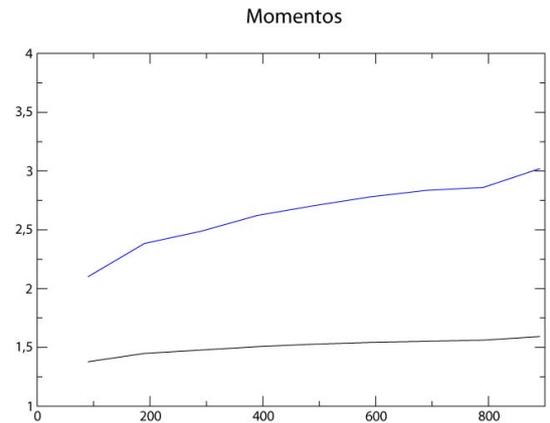
(a) Gráfico dos momentos M_3 e M_4 para a componente x para o caso da casca esférica com raio menor $R_1 = 5.0$ e raio maior $R_2 = 6.0$, $N = 2000$ e $\Delta t_{SUM} = 0.1$



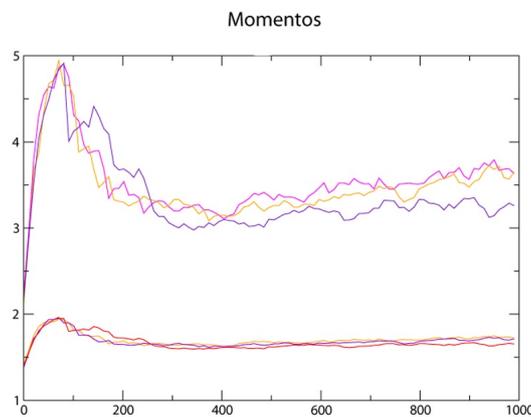
(b) Gráfico dos momentos M_3 e M_4 para a componente x para o caso da casca esférica com raio menor $R_1 = 5.0$ e raio maior $R_2 = 6.0$, $N = 2000$ e $\Delta t_{SUM} = 1.0$



(c) Gráfico dos momentos M_3 e M_4 para a componente x para o caso da casca esférica com raio menor $R_1 = 5.0$ e raio maior $R_2 = 6.0$, $N = 2000$ e $\Delta t_{SUM} = 10.0$



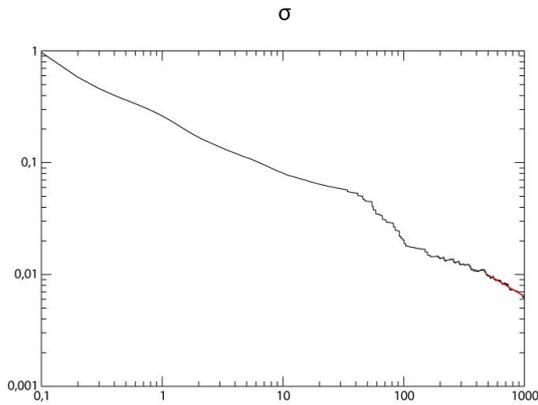
(d) Gráfico dos momentos M_3 e M_4 para a componente x para o caso da casca esférica com raio menor $R_1 = 5.0$ e raio maior $R_2 = 6.0$, $N = 2000$ e $\Delta t_{SUM} = 100.0$



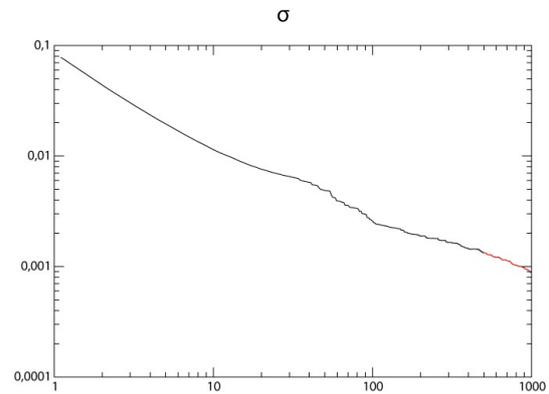
(e) Gráfico dos momentos M_3 e M_4 para as componentes x, y e z para o caso esférico com raio menor $R_1 = 0.0$ e raio maior $R_2 = 6.0$, $N = 2000$ e $\Delta t_{SUM} = 10.0$

6.2.1 Desvio padrão das velocidades

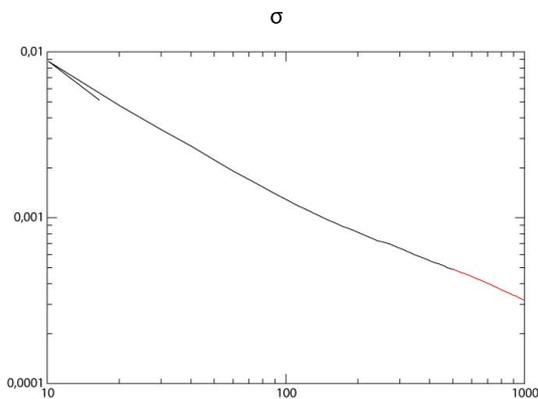
A análise do desvio padrão σ para o caso tridimensional é análogo ao que foi feito para o caso bidimensional, mas na etapa presente abordamos o comportamento do desvio padrão σ da variável \bar{y}_k para componente x da velocidade para diferentes condições iniciais, especificamente no que concerne ao valor de Δt_S . Observamos se o desvio σ tende a zero e o alcança aproximadamente no equilíbrio termodinâmico e se obedece a uma lei de potência. A figura (9) mostra o resultado obtido nas diferentes condições. O gráfico (a) ao se aproximar do equilíbrio obedece à função da forma $y = 0.515674x^{-0.635756}$ com coeficiente de correlação 0.987047, o gráfico (b) ao se aproximar do equilíbrio como $y = 0.0459008x^{-0.567939}$ sob o coeficiente de correlação 0.994102, enquanto o gráfico (c) como $y = 0.0248983x^{-0.630632}$ sob o coeficiente de correlação 0.999179 e o gráfico (d) $y = 0.0263356x^{-0.782546}$ com coeficiente de correlação de 0.999939.



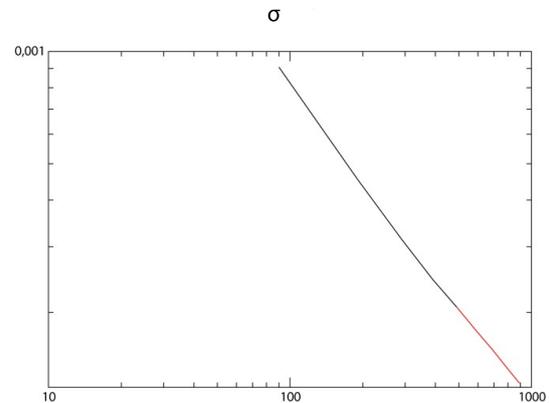
(a) Gráfico do desvio padrão das velocidades com $\Delta t_{SUM} = 0.1$



(b) Gráfico do desvio padrão das velocidades com $\Delta t_{SUM} = 1.0$



(c) Gráfico do desvio padrão das velocidades com $\Delta t_{SUM} = 10.0$



(d) Gráfico do desvio padrão das velocidades com $\Delta t_{SUM} = 100.0$

Figura 9: Gráficos do desvio padrão entre a média das velocidades do ensemble de partículas e média da velocidade de uma partícula para a componente x considerando um sistema de 2000 partículas com diferentes Δt_S .

É interessante perceber que no caso dos sistemas em três dimensões σ decai com coeficientes mais próximos de $-1/2$ que no caso bidimensional assim como observado em [1] em outro contexto. O desvio padrão das velocidades leva um tempo longo para se aproximar de zero, da ordem do tempo de vida do estado estacionário.

7 Conclusão

Estudamos e investigamos os sistemas autogravitantes bi e tridimensionais que têm interações de longo alcance, determinadas características como gaussianização e a própria ergodicidade. Utilizando simulações computacionais para a solução das equações de Hamilton dos sistemas, estudamos a evolução de varias propriedades destes: as energias potencial gravitacional e cinética, que permitiram observar o processo de relaxação violenta, e o comportamento do desvio padrão da média temporal das velocidades de cada partícula com o tempo, esta última para determinar em que condição o sistema é ergódico.

No que diz respeito apenas aos sistemas bidimensionais observamos tanto que a distribuição de velocidades como a das variáveis somadas y_k (5.6) tendem claramente para uma gaussiana de acordo com a análise de seus momentos estatísticos. O Teorema do Limite Central implica que esse comportamento ocorre para variáveis aleatórias, ou seja, não-correlacionadas. No presente caso, as variáveis são fortemente correlacionadas, porém sua soma tende lentamente para uma variável com distribuição gaussiana (vide [46] para uma discussão desse processo). O aspecto de maior destaque é, de fato, o problema da ergodicidade. A análise desse ponto foi feita usando como instrumento a investigação do desvio padrão σ da média temporal das velocidades de uma única partícula e a média do ensemble de partículas. Isso equivale a dizer que a média temporal de uma grandeza sobre a história de uma partícula é igual à média sobre o ensemble de partículas em um tempo fixo, ou

ainda, que uma dada partícula explora igualmente todos os estados acessíveis a ela. Esse conceito é o mesmo utilizado no recente teste experimental realizado no ano de 2011 e relatado em [12].

Concluimos então que no caso bidimensional o sistema se torna sim ergódico, uma vez que, paulatinamente σ se aproxima de zero, mas apenas para tempos da ordem do necessário para o equilíbrio termodinâmico. Para o caso tridimensional temos algumas distinções cruciais. Primeiro o desvio padrão das velocidades tende a zero de maneira sensivelmente mais lenta e menos evidente. Isso se deve à complicação do fenômeno de evaporação de partículas, que não ocorre no caso bidimensional.

Muito ainda pode ser feito no sentido de melhorar os resultados que obtemos no presente trabalho. Podemos utilizar simulações computacionais para um maior número de partículas, o que nos levaria a uma maior acurácia nos resultados, para tanto é necessário o uso de máquinas ainda mais poderosas, uma vez que esse tipo de procedimento demanda um tempo maior. É interessante também fazer o mesmo tipo de análise aqui feita mas para sistemas em uma dimensão, onde podemos usar uma força constante, o que simplificaria bastante todo o processo, embora neste trabalho nosso objetivo foi dar ênfase a contextos mais próximos da realidade (duas e três dimensões).

APÊNDICE A – Algoritmos numéricos utilizados

A.1 Integrador simplético

Reproduzimos aqui o algoritmo para o integrador simplético baseado no descrito em [14] de Yoshida, utilizado para a simulação dos sistemas com N corpos mutualmente autogravitantes em duas dimensões:

```

IMPLICIT NONE

COMMON R,P,F,N

INTEGER N,NMAX,SEED,I,J,SEQ,INTEG,KSAVE

INCLUDE 'dimmax.inc'

REAL*8 R(NMAX),P(NMAX),F(NMAX),DT,TF,TS,
.      BO,B1,DO,D1,ROLD,
.      R1,R2,TIME,TC,CSI,LAMBDA,XI,EN,ENO,DE,TRELAX,TCSAVE,SAVINT,
.      KO,EPS,SV(NMAX),MX2,MY2,MX4,MY4,GX2,GY2,GX4,GY4,TCS,DTSUM

COMMON /SMOOTH/ EPS

PARAMETER (CSI=0.1644986515575760D+0,
.          LAMBDA=-0.2094333910398989D-1,
.          XI=0.1235692651138917D+1)

PARAMETER (BO = .675603595979828813,
.          B1 = -.175603595979828813,
.          DO = 1.35120719195965763,

```

```
.          D1 = -1.70241438391931525)
OPEN(UNIT=12,FILE='data.in',STATUS='OLD')
READ(12,*) INTEG
READ(12,*) DT
READ(12,*) TF
READ(12,*) TS
READ(12,*) N
READ(12,*) EPS
READ(12,*) R1
READ(12,*) R2
READ(12,*) KO
READ(12,*) SEED
READ(12,*) SEQ
READ(12,*) TRELAX
READ(12,*) DTSUM
READ(12,*) SAVINT
CLOSE(12)
PRINT *,' '
PRINT *,'===== '
PRINT *,'DT, TF, TS = ',DT,TF,TS
PRINT *,'N = ',N
PRINT *,'SEED= ',SEED
PRINT *,'SEQ,TRELAX= ',SEQ,TRELAX
PRINT *,'===== '
PRINT *,' '
PRINT *,' '
PRINT *,'Preparing the initial condition...'
CALL CONDINIT(R1,R2,KO,SEED)
```

```
PRINT *, ''
OPEN (UNIT=20, FILE='out.dat', STATUS='UNKNOWN')
OPEN (UNIT=21, FILE='seqr.dat', STATUS='UNKNOWN')
OPEN (UNIT=24, FILE='seqp.dat', STATUS='UNKNOWN')
OPEN (UNIT=18, FILE='force.dat', STATUS='UNKNOWN')
OPEN (UNIT=19, FILE='error.dat', STATUS='UNKNOWN')
OPEN (UNIT=26, FILE='moments.dat', STATUS='UNKNOWN')
OPEN (UNIT=25, FILE='gaussianize.dat', STATUS='UNKNOWN')
OPEN (UNIT=27, FILE='phase.dat', STATUS='UNKNOWN')
TIME=0.0D+0
PRINT *, 'Computing the initial energy...'
CALL OUTP(20, ENO, TIME)
PRINT *, 'Initial energy: ', ENO/N
PRINT *, ''
PRINT *, ''
TC=0.0D+0
TCS=0.0D+0
TCSAVE=0.0D+0
KSAVE=1000
ROLD=R(SEQ)
CALL FORCE()
OPEN (UNIT=22, FILE='phase1.dat', STATUS='UNKNOWN')
OPEN (UNIT=23, FILE='phase2.dat', STATUS='UNKNOWN')
C
C BEGINING OF THE TEMPORAL LOOP
C
      IF (INTEG.NE.1) GOTO 150
C OMELYN ET AL INTEGRATOR:
```

```
100  DO 200 I=1,2*N
      P(I)=P(I)+CSI*DT*F(I)
      R(I)=R(I)+(1-2.0D+0*LAMBDA)*DT*P(I)/2.0D+0
200  CONTINUE
      CALL FORCE()
      DO 300 I=1,2*N
      P(I)=P(I)+XI*DT*F(I)
      R(I)=R(I)+LAMBDA*DT*P(I)
300  CONTINUE
      CALL FORCE()
      DO 400 I=1,2*N
      P(I)=P(I)+(1.0D+0-2.0D+0*(XI+CSI))*DT*F(I)
      R(I)=R(I)+LAMBDA*DT*P(I)
400  CONTINUE
      CALL FORCE()
      DO 500 I=1,2*N
      P(I)=P(I)+XI*DT*F(I)
      R(I)=R(I)+(1.0D+0-2.0D+0*LAMBDA)*DT*P(I)/2.0D+0
500  CONTINUE
      CALL FORCE()
      DO 600 I=1,2*N
      P(I)=P(I)+CSI*DT*F(I)
600  CONTINUE
      GOTO 800

C YOSHIDA INTEGRATOR
150  DO 250 I=1,2*N
      P(I)=P(I)+B0*DT*F(I)
      R(I)=R(I)+D0*DT*P(I)
```

```
250  CONTINUE
      CALL FORCE()
      DO 350 I=1,2*N
          P(I)=P(I)+B1*DT*F(I)
          R(I)=R(I)+D1*DT*P(I)
350  CONTINUE
      CALL FORCE()
      DO 450 I=1,2*N
          P(I)=P(I)+B1*DT*F(I)
          R(I)=R(I)+D0*DT*P(I)
450  CONTINUE
      CALL FORCE()
      DO 550 I=1,2*N
          P(I)=P(I)+B0*DT*F(I)
550  CONTINUE
C
C
800  TC=TC+DT
      TCS=TCS+DT
      TCSAVE=TCSAVE+DT
      TIME=TIME+DT
      IF ((TCSAVE.GE.SAVINT).OR.(TIME.LT.1.5D+0*DT)) THEN
          TCSAVE=0.0D+0
          OPEN(UNIT=KSAVE,STATUS='UNKNOWN')
          DO 1100 I=1,N
              WRITE(KSAVE,*) R(I),R(I+N)
1100  CONTINUE
      CLOSE(KSAVE)
```

```
        KSAVE=KSAVE+1
ENDIF
IF (TC.GE.TS) THEN
    TC=0.0D+0
    CALL OUTP(20,EN,TIME)
    DE=DABS((EN-ENO)/EN)
    PRINT *,TIME,DE
    WRITE(19,*) TIME,DE
    WRITE(18,*) TIME,F(SEQ)
    WRITE(21,5000) TIME,R(SEQ)
    WRITE(24,5000) TIME,P(SEQ)
    ROLD=R(SEQ)
5000    FORMAT(4F12.5)
ENDIF
IF ((TCS.GE.DTSUM).AND.(TIME.GE.TRELAX)) THEN
    TCS=0.0D+0
    MX2=0.0D+0
    MX4=0.0D+0
    GX2=0.0D+0
    GX4=0.0D+0
    MY2=0.0D+0
    MY4=0.0D+0
    GY2=0.0D+0
    GY4=0.0D+0
    DO 900 I=1,N
        SV(I)=SV(I)+P(I)
        SV(I+N)=SV(I+N)+P(I+N)
        MX2=MX2+SV(I)**2
```

```

        MY2=MY2+SV(I+N)**2
        MX4=MX4+SV(I)**4
        MY4=MY4+SV(I+N)**4
        GX2=GX2+P(I)**2
        GY2=GY2+P(I+N)**2
        GX4=GX4+P(I)**4
        GY4=GY4+P(I+N)**4
900    CONTINUE
        MX2=MX2/N
        MX4=MX4/N
        GX2=GX2/N
        GX4=GX4/N
        MY2=MY2/N
        MY4=MY4/N
        GY2=GY2/N
        GY4=GY4/N
        WRITE(26,*) TIME, MX4/MX2**2, MY4/MY2**2
        WRITE(25,*) TIME, GX4/GX2**2, GY4/GY2**2
    ENDIF
    IF (TIME.LT.TF) THEN
        IF (INTEG.EQ.1) GOTO 100
        GOTO 150
    ENDIF
    DO 1000 I=1,2*N
        WRITE(22,*) R(I),P(I)
1000  CONTINUE
    IF (TIME.LT.TF) THEN
        IF (INTEG.EQ.1) GOTO 100
```

```
        GOTO 150
    ENDIF
    DO 1200 I=1,N
        WRITE(27,2000) R(I),R(I+N),P(I),P(I+N)
1200    CONTINUE
2000    FORMAT(4F30.16)
        CLOSE(18)
        CLOSE(19)
        CLOSE(20)
        CLOSE(21)
        CLOSE(22)
        CLOSE(25)
        CLOSE(26)
        CLOSE(27)
    END
```

A.2 Programa N-body

Reproduzimos aqui o algoritmo em Fortran baseado no original de Sverre.J. Aarseth [11] que descreve sistemas com N corpos mutualmente autogravitantes em três dimensões:

Algumas modificações e acréscimos foram feitos no programa de Aarseth de acordo com nossas necessidades, como por exemplo em relação ao número de partículas, uma vez que o programa original de Aarseth faz uma boa descrição até $N = 50$, para valores maiores modificações são necessárias.

```
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
```

```

INCLUDE 'dimmax.inc'

COMMON X(3,NMAX),XDOT(3,NMAX),BODY(NMAX),D2(3,NMAX),D3(3,NMAX),
.      EPS2,N
REAL*8 X0(3,NMAX),XODOT(3,NMAX),TO(NMAX),STEP(NMAX),F(3,NMAX),
.      FDOT(3,NMAX),FIRR(3),FD(3),PSUM(3,NMAX),DTSUM,TC,
.      MU(3),SIGMA(3),M3(3),M4(3),TRELAX,R(NMAX),
.      SX,SY,SZ,KX,KY,KZ,VXM,VYM,VZM,AVX,AVY,AVZ,SAVEINT,SCOUNT
INTEGER NEXT(NMAX),IFSAVE,N2

DATA TIME,TNEXT,SMAX,TMIN,NSTEPS /0.0D0,0.0D0,64.0D0,1.0D+10,0/

OPEN(UNIT=12,FILE='nbody0.in',STATUS='OLD')

OPEN(UNIT=14,FILE='condini.dat',STATUS='OLD')

READ (12,*) N, ETA, DELTAT, TCRIT, EPS2, IFSAVE, DTSUM, TRELAX,
.      SAVEINT,RMAX

READ (14,*) (BODY(I), (X(K,I),K=1,3), (XDOT(K,I),K=1,3),I=1,N)

CLOSE(12)

CLOSE(14)

PRINT *, 'N, ETA, DELTAT, TCRIT, EPS2, IFSAVE, DTSUM, TRELAX, RMAX',
.      N, ETA, DELTAT, TCRIT, EPS2, IFSAVE, DTSUM, TRELAX, RMAX

OPEN(UNIT=17,FILE='out.dat',STATUS='UNKNOWN')

OPEN(UNIT=19,FILE='energy.dat',STATUS='UNKNOWN')

OPEN(UNIT=20,FILE='momenta.dat',STATUS='UNKNOWN')

OPEN(UNIT=22,FILE='sigma.dat',STATUS='UNKNOWN')

OPEN(UNIT=24,FILE='gaussianize.dat',STATUS='UNKNOWN')

OPEN(UNIT=26,FILE='avg_vel.dat',STATUS='UNKNOWN')

WRITE(17,*) N

WRITE(17,*) DELTAT

AVX=0.0D+0

AVY=0.0D+0

```

```
      AVZ=0.0D+0
      DO 2 I=1,N
          AVX=AVX+XDOT(1,I)
          AVY=AVY+XDOT(2,I)
          AVZ=AVZ+XDOT(3,I)
2      CONTINUE
      AVX=AVX/N
      AVY=AVY/N
      AVZ=AVZ/N
      PRINT *, 'Initial average velocities: ',AVX,AVY,AVZ
C
      IF (IFSAVE.EQ.1) THEN
          WRITE(17,*) 0.0D+0
          DO 3 I=1,N
              WRITE(17,12) BODY(I),(X(K,I),K=1,3),(XDOT(K,I),K=1,3),STEP(I)
3          CONTINUE
      ENDIF
C
*      Initialize forces and time-steps.
      DO 5 J = 1,N
          CALL FFDOT(J,FIRR,FD)
          DO 4 K = 1,3
              F(K,J) = 0.5*FIRR(K)
              FDOT(K,J) = FD(K)/6.0
              X0(K,J) = X(K,J)
              XODOT(K,J) = XDOT(K,J)
4          CONTINUE
          STEP(J) = SQRT(ETA/SQRT(FIRR(1)**2 + FIRR(2)**2 + FIRR(3)**2))
```

```

*      Create a truncated block time-step according to STEP = 1/2**(K-1).
      K = 2 + LOG(SMAX/STEP(J))/LOG(2.0D0)
      STEP(J) = SMAX/2.0D0**(K-1)
      TMIN = MIN(STEP(J),TMIN)
      TO(J) = 0.0D0
5  CONTINUE
C
TC=0.0D+0
DO 6 J=1,N
      PSUM(1,J)=BODY(J)*XDOT(1,J)
      PSUM(2,J)=BODY(J)*XDOT(2,J)
      PSUM(3,J)=BODY(J)*XDOT(3,J)
6  CONTINUE
      SCOUNT=0.0D+0
C =====
*      Obtain the total energy and generate some output.
10 EK = 0.0D0
      POT = 0.0D0
      SCOUNT=SCOUNT+DELTAT
C Here we save the masses, positions, velocities and time steps in file ou
C IFSAVE=1 saves the data. Any other values it doesn't.
      IF ((IFSAVE.EQ.1).AND.(SCOUNT.GE.SAVEINT)) THEN
          SCOUNT=0.0D+0
          WRITE(17,*) TIME
          DO 13 I=1,N
              WRITE(17,12) BODY(I),(X(K,I),K=1,3),(XDOT(K,I),K=1,3),STEP(I)
13      CONTINUE
      ENDIF

```

```

12     FORMAT(F8.3,2X,3F16.3,2X,3F16.2,F10.6)
      DO 15 I = 1,N
          EK = EK + BODY(I)*(XDOT(1,I)**2 + XDOT(2,I)**2 + XDOT(3,I)**2)
          DO 14 J = I+1,N
              POT = POT + BODY(I)*BODY(J)/SQRT((X(1,I) - X(1,J))**2 +
&          (X(2,I) - X(2,J))**2 + (X(3,I) - X(3,J))**2 + EPS2)
14     CONTINUE
15     CONTINUE
C Here we save kinetic and potential energies per particle in file energy.
      WRITE(19,*) TIME,0.5D+0*EK/N,-POT/N
      WRITE (6,18)  TIME, NSTEPS, 0.5*EK - POT
18     FORMAT (' TIME =',F10.2,'  NSTEPS =',I12,'  ENERGY =',F18.8)
      IF (TIME.GT.TCRIT) THEN
          CLOSE(17)
          CLOSE(19)
          CLOSE(20)
          CLOSE(22)
          CLOSE(24)
          CLOSE(26)
          STOP
      ENDIF
C Here we sum the momenta
      TC=TC+DELTAT
      IF ((TC.GE.DTSUM).AND.(TIME.GE.TRELAX)) THEN
          TC=0.0D+0
          DO 19 I=1,N
              DO 123 J=1,3
                  PSUM(J,I)=PSUM(J,I)+BODY(I)*XDOT(J,I)

```

```
123      CONTINUE
19       CONTINUE
        SX=0.0D+0
        SY=0.0D+0
        SZ=0.0D+0
        KX=0.0D+0
        KY=0.0D+0
        KZ=0.0D+0
        VXM=0.0D+0
        VYM=0.0D+0
        VZM=0.0D+0

C Computes the average, stadard deviation and Moments of each component of
C for particles that are a distance from orgin less than RMAX
        N2=0
        DO 80 I=1,N
            R(I)=DSQRT(X(1,I)**2+X(2,I)**2+X(3,I)**2)
            IF (R(I).LT.RMAX) THEN
                N2=N2+1
                VXM=VXM+XDOT(1,I)
                VYM=VYM+XDOT(2,I)
                VZM=VZM+XDOT(3,I)
            ENDIF
80      CONTINUE
        VXM=VXM/N2
        VYM=VYM/N2
        VZM=VZM/N2
        DO 90 I=1,N
            IF (R(I).LT.RMAX) THEN
```

```

          SX=SX+(XDOT(1,I)-VXM)**2
          SY=SY+(XDOT(2,I)-VYM)**2
          SZ=SZ+(XDOT(3,I)-VZM)**2
          KX=KX+(XDOT(1,I)-VXM)**4
          KY=KY+(XDOT(2,I)-VYM)**4
          KZ=KZ+(XDOT(3,I)-VZM)**4
      ENDIF
90      CONTINUE
          SX=SX/N2
          SY=SY/N2
          SZ=SZ/N2
          KX=KX/(N2*SX**2)
          KY=KY/(N2*SY**2)
          KZ=KZ/(N2*SZ**2)
          WRITE(24,91) TIME-TRELAX,KX,KY,KZ
91      FORMAT(4F26.20)
          DO 100 I=1,3
              MU(I)=0.0D+0
              SIGMA(I)=0.0D+0
              DO 110 J=1,N
                  IF (R(J).LT.RMAX) THEN
                      MU(I)=MU(I)+PSUM(I,J)
                  ENDIF
              ENDIF
110     CONTINUE
          MU(I)=MU(I)/N2
          DO 120 J=1,N
              IF (R(J).LT.RMAX) THEN
                  SIGMA(I)=SIGMA(I)+(PSUM(I,J)-MU(I))**2
              ENDIF
          ENDIF
      ENDIF
```

```

                ENDIF
120             CONTINUE
                SIGMA(I)=DSQRT(SIGMA(I)/N2)
                M3(I)=0.0D+0
                M4(I)=0.0D+0
                DO 130 J=1,N
                    IF (R(J).LT.RMAX) THEN
                        M3(I)=M3(I)+DABS(PSUM(I,J)-MU(I))**3
                        M4(I)=M4(I)+(PSUM(I,J)-MU(I))**4
                    ENDIF
130             CONTINUE
                M3(I)=M3(I)/(SIGMA(I)**3*N2)
                M4(I)=M4(I)/(SIGMA(I)**4*N2)
100             CONTINUE
                PRINT *, 'Number of remaining particles: ',N2
                WRITE(20,200) TIME-TRELAX,(M3(I),I=1,3),(M4(I),I=1,3)
                WRITE(22,200) TIME-TRELAX,(SIGMA(I),I=1,3),(MU(I),I=1,3)
                WRITE(26,205) TIME-TRELAX,VXM,VYM,VZM
200             FORMAT(7F14.6)
205             FORMAT(4F24.16)
                ENDIF
C
                TNEXT = TNEXT + DELTAT
*           Determine block of particles to be advanced at TMIN and set new ti
20 LENGTH = 0
                DO 25 J = 1,N
                    IF (TO(J) + STEP(J).EQ.TMIN) THEN
                        LENGTH = LENGTH + 1

```

```

                NEXT(LENGTH) = J
            END IF
25 CONTINUE
    TIME = TMIN
*       Predict all coordinates and velocities to order FDOT.
    DO 30 J = 1,N
        S = TIME - T0(J)
        DO 28 K = 1,3
            X(K,J) = ((FDOT(K,J)*S + F(K,J))*S + XODOT(K,J))*S + X0(K,J)
            XDOT(K,J) = (FDOT(K,J)*1.5*S + F(K,J))*2.0*S + XODOT(K,J)
28      CONTINUE
30 CONTINUE
    TMIN = 1.0D+10
    DO 50 L = 1,LENGTH
        I = NEXT(L)
*       Evaluate new force and first derivative for body #I.
        CALL FFDOT(I,FIRR,FD)
*       Include Hermite corrector and set new F/2, FDOT/6, D2, & D3.
        DT = TIME - T0(I)
        T0(I) = TIME
        DO 40 K = 1,3
            DF = 2.0*F(K,I) - FIRR(K)
            FID = 6.0*FDOT(K,I)
            SUM = FID + FD(K)
            AT3 = 2.0*DF + DT*SUM
            BT2 = -3.0*DF - DT*(SUM + FID)
            X0(K,I) = (0.6*AT3 + BT2)*DT**2/12.0 + X(K,I)
            XODOT(K,I) = (0.75*AT3 + BT2)*DT/3.0 + XDOT(K,I)
40      CONTINUE
50 CONTINUE

```

```

      F(K,I) = 0.5*FIRR(K)
      FDOT(K,I) = FD(K)/6.0
      D2(K,I) = (3.0*AT3 + BT2)*2.0/DT**2
      D3(K,I) = AT3*6.0/DT**3
40    CONTINUE
*     Form new time-step from force derivatives and check change.
      FI2 = FIRR(1)**2 + FIRR(2)**2 + FIRR(3)**2
      FD2 = FD(1)**2 + FD(2)**2 + FD(3)**2
      FD22 = D2(1,I)**2 + D2(2,I)**2 + D2(3,I)**2
      FD32 = D3(1,I)**2 + D3(2,I)**2 + D3(3,I)**2
      SI = SQRT(ETA*(SQRT(FI2*FD22) + FD2)/(SQRT(FD2*FD32) + FD22))
      IF (SI.GT.2.0*STEP(I).AND.DMOD(TIME,2.0*STEP(I)).EQ.0.DO) THEN
          STEP(I) = MIN(2.0*STEP(I),SMAX)
      ELSE IF (SI.LT.STEP(I)) THEN
          STEP(I) = 0.5*STEP(I)
      END IF
      TMIN = MIN(TO(I) + STEP(I),TMIN)
      NSTEPS = NSTEPS + 1
50    CONTINUE
      IF (TIME.LT.TNEXT) GO TO 20
      GO TO 10
      END
C =====
      SUBROUTINE FFDOT(I,FIRR,FD)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      INCLUDE 'dimmax.inc'
      COMMON X(3,NMAX),XDOT(3,NMAX),BODY(NMAX),D2(3,NMAX),D3(3,NMAX),
      .      EPS2,N

```

```
REAL*8  FIRR(3),FD(3),A(3),DV(3)
DO 1 K = 1,3
    FIRR(K) = 0.0D0
    FD(K) = 0.0D0
1 CONTINUE
DO 20 J = 1,N
    IF (J.EQ.I) GO TO 20
    DO 5 K = 1,3
        A(K) = X(K,J) - X(K,I)
        DV(K) = XDOT(K,J) - XDOT(K,I)
5     CONTINUE
        RIJ2 = A(1)**2 + A(2)**2 + A(3)**2 + EPS2
        DR3I = BODY(J)/(RIJ2*SQRT(RIJ2))
        DRDV = 3.0*(A(1)*DV(1) + A(2)*DV(2) + A(3)*DV(3))/RIJ2
        DO 10 K = 1,3
            FIRR(K) = FIRR(K) + A(K)*DR3I
            FD(K) = FD(K) + (DV(K) - A(K)*DRDV)*DR3I
10     CONTINUE
20 CONTINUE
RETURN
END
```

Referências

- [1] FIGUEIREDO, A.; ROCHA FILHO, T. M.; AMATO, M. A. Ergodicity and central limit theorem in systems with long rang interactions. *Europhysics Letters*, 83, 30011, 2008.
- [2] DAUXOIS, T. et al. *Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long Range Interactions: An Introduction*. Berlim: Springer, 2002.
- [3] LYNDEN-BELL, D. Statistical mechanics of violent relaxation in stellar systems. *Mon. Not. R. Astr.*, 136, 101-121, 1967.
- [4] NAKAMURA, T. K. Statical mechanics of a colisionless system based on de maximum entropy principle. *The Astrophysical Journal*, 531: 739-743, 2000.
- [5] SHU, F. H. On the statistical mechanics of violent relaxation. *The Astrophysical Journal*, 225, 83-94, 1978.
- [6] STIAVELLI, M.; BERTIN, G. Statistical mechanics and equilibrium sequences of ellipticals. *Mon. Not. R. Astr.*, 229, 61-71, 1987.
- [7] HERNQUIST, L.; SPERGEL, D. N. *The Astrophysical Journal*, 339, 117, 1992.
- [8] KULL, A.; TREUMANN, R. A.; BÖHRINGER, H. A note on the statistical mechanics of violent relaxation of phase space elements of different densities. *The Astrophysical Journal*, 484, 58-62, 1997.
- [9] BERTIN, G.; TRENTI, M. Thermodynamical description of a family of partially relaxed stellar systems. *arXiv: astro-ph/0210677v1*, 2002.
- [10] CAMPA, A.; DAUXOIS, T.; RUFFO, S. Statistical mechanics and dynamics of solvable models with long-range interactions. *Physics Reports* 480, 57-159, 2009.
- [11] BINNEY, J.; TREMAINE, S. *Galactic Dynamics*. USA: Princeton University Press, 1987.
- [12] FEIL, F. et al. Single-particle and ensemble diffusivities—test of ergodicity. DOI: 10.1002/anie.201105388, *Angewandte Chemie International Edition*, 50, 1-5, 2011.
- [13] AARSETH, S. J.; TOUT, C. A.; MARDLING, R. A. *The Cambridge N- Body Lectures*. Berlin Heidelberg: Springer, 2008.

-
- [14] YOSHIDA, H. Construction of higher order symplectic integrators. *Physics Letters A*, 150, 5,6,7, 1990.
- [15] SCHLIER, C.; SEITER, A. High order symplectic integration: an assessment. *Computer Physics communications* 130, 176-189, 2000.
- [16] LEVIN, Y.; PAKTER, R.; TELES, T. Collisionless relaxation in non-neutral plasmas. *Physical Review Letters*, 100, 040604, 2008.
- [17] BARRÉ, J.; MUKAMELL, D.; RUFFO, S. Inequivalence of ensembles in a system with long range interactions. *Physical Review Letters*, 87, 03, 2001.
- [18] TOUCHETTE, H. Ensemble equivalence for general many body systems. *arXiv: 1106.2979 [cond- mat.- stat- mech]*, 2011.
- [19] TOUCHETTE, H.; ELLIS, R. S.; TURKINGTON, B. An introduction to the thermodynamic and macrostate levels of nonequivalente ensembles. *Physica A* 340, 138-146, 2004.
- [20] MAXWELL., J. C. *On Boltzmann's Theorem on the average distribution of energy in a system with material points*. London: Cambridge Philosophical Society's Trans., 1876.
- [21] THIRRING, W. E. Systems with negative specif heat. *Z.f. Phys.* 235, 339, 1970.
- [22] LYNDEN-BELL, D.; LYNDEN-BELL, R. M. On the negative specific heat paradox. *Mon. Not. R. Astr.*, 181, 405-419, 1977.
- [23] HAWKING, S. W. *Nature*, 248, 30, 1974.
- [24] ARAD, I.; BELL, D. L. Inconsistency in relaxation theories. *Mon, Not. R. Astr.* 361, 385-395, 2005.
- [25] BRAUN, W.; HEPP, K. The vlasov dynamics and its fluctuations in the $1/n$ limit of interacting classical particles. *Commun. math. Phys.* 56, 125—146, 1977.
- [26] ARAD, I.; JOHANSSON, P. H. A numerical comparasion of theories of violente relaxation. *Mon, Not. R. Astr.* 362, 252-262, 2005.
- [27] LIBOFF, R. L. *Kinetic Theory*. New York: Springer, 1931.
- [28] KHINCHIN, A. I. *Mathematical Foundations of Statistical Mechanics*. USA: Dover publications, 1949.
- [29] HILHORST, H. J. Central limit theorems for correlated variables: some critical remarks. *Brazilian Journal of Physics*, vol. 39, no. 2A, 2009.
- [30] HILHORST, H. J.; SCHEHR, G. A note on q-gaussians and non-gaussians in statistical mechanics. *J. Stat. Mech.*, P06003, 2007.

-
- [31] DAUXOIS, T. Non-gaussian distributions under scrutiny. *J. Stat. Mech.*, N08001, 2007.
- [32] PLUCHINO, A.; RAPISARDA, A.; C.TSALLIS. Nonergodicity and central limit behavior in long-range hamiltonians. *Europhysics Letters*, 80, 26002, 2007.
- [33] FILHO, T. M. R. *Mecânica Clássica*. Brasil: [s.n.], 2009.
- [34] BADINO, M. The foundational role of ergodicity theory. *Preprint 292*, 2005.
- [35] SZASZ, D. Boltzmann's ergodic hypothesis, a conjecture for centuries? *Preprint ESI 98*, 1994.
- [36] EHRENFEST, P.; EHRENFEST, T. *The Conceptual Foundations of the Statistical Approach in Mechanics*. USA: Dover phoenix editions, 1959.
- [37] BRUSH, S. Proof of the impossibility of ergodic systems: the 1913 papers of rosenthal an plancherel. *Transport theory Statist. Phys.*, 4, 287-298, 1971.
- [38] BIRKHOFF, G. D. Proof of the ergodic theorem. *PNAS*, 17, 656, 1931.
- [39] BALESCU, R. *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics*. USA: Wiley Interscience publication, 1975.
- [40] TREMAINE, S. The geometry of phase mixing. *Mon. Not. R. Astr.*, 307, 877-883, 1999.
- [41] ARNOLD, V. I.; AVEZ, A. *Ergodic Problem of Classical Mechanics*. USA: Benjamin, 1968.
- [42] FOREST, E. Canonical integrators as tracking codes. *SSC 138*, 1987.
- [43] NERI, F. Lie algebras and canonical integration. *Department of physics, University of Marylando, preprint*, 1988.
- [44] ANTON, M.; RUFFO, S.; TORCINI, A. First- and second-order clustering transitions for a system with infinite-range attractive interaction. *PRE* 66,025103(R), 2002.
- [45] TORCINI, A.; ANTONI, M. Equilibrium and dynamical properties of two-dimensional n-body systems with long-range attractive interactions. *PRE* 59, 3, 1999.
- [46] MANTEGNA, R.; STANLEY, H. Stochastic process with ultraslow convergence to a gaussian: The truncated lévy flight. *Physical Review Letters* 73, 2946-2949, 1994.