



UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA  
INSTITUTO DE FÍSICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

TESE DE DOUTORADO

Brasília  
Outubro de 2019



UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA  
INSTITUTO DE FÍSICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**“Dinâmica e termodinâmica  
de sistemas de longo alcance e curto alcance:  
um “Toy Model” ao modelo cosHMF com colisões.”**

Igor Melo de Sousa

*Orientador:* Prof. Dr. Annibal Dias de Figueiredo Neto.

*Co-orientador:* Prof. Dr. Yves Elskens.

Brasília

Outubro de 2019

“Dinâmica e termodinâmica  
de sistemas de longo alcance e curto alcance:  
um “Toy Model” ao modelo cosHMF com colisões.”

Igor Melo de Sousa

Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade de Brasília como parte dos requisitos necessários para obtenção do título de Doutor em Ciências (Física).

Orientador: Prof. Dr. Annibal Dias de Figueiredo Neto.

Co-orientador: Prof. Dr. Yves Elskens.

Banca Examinadora

---

Prof. Dr. Annibal Dias de Figueiredo Neto (Orientador)

---

Prof. Dr. Bruno Vieira Ribeiro (Membro Externo)

---

Prof. Dr. Luciano Hugo Miranda Filho (Membro Externo)

---

Prof. Dr. Tarcisio Marciano da Rocha Filho (Membro Interno)

Brasília

Outubro de 2019

Ficha catalográfica elaborada automaticamente,  
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

MM528d      Melo de Sousa, Igor  
Dinâmica e Termodinâmica de sistemas de longo alcance com  
curto alcance: um Toy Model ao modelo cosHMF com colisões /  
Igor Melo de Sousa; orientador Annibal Dias de Figueiredo  
Neto; co-orientador Yves Elskens. -- Brasília, 2019.  
129 p.

Tese (Doutorado - Doutorado em Física) -- Universidade de  
Brasília, 2019.

1. Sistemas de longo alcance. 2. Modelo cosHMF com  
colisões. 3. Event-driven. I. Dias de Figueiredo Neto,  
Annibal, orient. II. Elskens, Yves, co-orient. III. Título.

## Resumo

Nesta tese analisamos a mecânica estatística e termodinâmica de sistemas de curto e longo alcance. Conhecido as propriedades elementares dos sistemas de curto alcance, como o equilíbrio termodinâmico e ergodicidade, nos deparamos com situação oposta quando estudamos os sistemas de longo alcance, pois tais sistemas não seguem as previsões básicas da teoria termodinâmica e mecânica estatística tradicional.

Baseando-se nas diferenças entre os dois tipos de sistemas, desejamos um sistema misto, composto por interação de curto e longo alcance. Propomos ao modelo de longo alcance cosHMF efeitos colisionais que são característicos de sistemas de curto alcance, com o objetivo de analisar as propriedades estatísticas e termodinâmicas, impondo a simples pergunta: um sistema com interação de curto e longo alcance apresentará quais propriedades termodinâmica e estatísticas?

Como meio de solução, é proposto um novo método numérico de dinâmica molecular que inclui as interações de curto e longo alcance. Estudamos o equilíbrio termodinâmico ao sistema proposto por intermédio de ensaios numéricos, onde analisamos a curtoses das velocidades.

Brasília

2019

---

## Résumé

Dans cette thèse, nous analysons la mécanique statistique et la thermodynamique des systèmes à courte et longue portée. En prenant en considération les propriétés élémentaires des systèmes à courte portée, tels que l'équilibre thermodynamique et l'ergodicité, nous sommes confrontés à une situation inverse lorsque nous étudions des systèmes à longue portée car ces types de systèmes ne suivent pas les prédictions de base de la théorie thermodynamique et de la mécanique statistique traditionnelle.

Sur la base des différences entre les deux types de systèmes, nous souhaitons proposer un système mixte, composé d'interactions à courte et longue portée. Nous proposons d'inclure au modèle cosHMF (longue portée) des effets de collision (courte portée), dans le but d'analyser les propriétés statistiques et thermodynamiques. De ce fait, ce système nous permet de nous poser la question suivante : quelles propriétés thermodynamique et statistique présentera un système avec des interactions à courte et longue portée ?

En guise de moyen de résolution, une nouvelle méthode numérique de dynamique moléculaire est proposée qui inclut les interactions à courte et à longue portée. Nous étudions l'équilibre thermodynamique du système proposé à l'aide de tests numériques, où nous analysons la kurtosis des vitesses.

Brasília

2019

## *Abstract*

In this thesis we analyze the statistical and thermodynamic mechanics of short and long range systems. We know the elementary properties of short-range systems, such as thermodynamic equilibrium and ergodicity. On the other hand, we are faced with an opposite situation when we study long-range systems, since such systems do not follow the basic predictions of traditional thermodynamic theory and statistical mechanics.

Based on the differences between the two types of systems, we want to analyze a mixed system, in which is composed by short- and long-range interaction. We propose to include to cosHMF model (long range) collision effects (short range), with the objective of analyzing the statistical and thermodynamic properties. This system allows us to raise one simple question: which thermodynamic and statistical properties will a system with short and long range interactions present?

As a solution, a new numerical method of molecular dynamics is proposed, such method rich includes the short and long range interactions. We study the thermodynamic equilibrium of the proposed system by means of numerical tests, where we analyze the kurtosis of velocities.

Brasília

2019

*“Dedico este trabalho a minha mãe, meus irmãos, padastro e sobrinhos,  
a minha companheira Sandrine e suas adoráveis crianças Othilie e Pablo.  
Em especial, dedico este trabalho ao meu querido pai (in memoriam).”*

*“Pensamentos valem e vivem pela observação  
exata ou nova, pela reflexão aguda ou profunda;  
não menos querem a originalidade,  
a simplicidade e a graça do dizer”.*

*– Machado de Assis (escritor e jornalista brasileiro).*

*“Toute science est une connaissance certaine et évidente”.*

*– René Descartes (filósofo e cientista francês).*

*“O amor não se manifesta no desejo de fazer amor com alguém,  
mas no desejo de partilhar o sono.*

*– Milan Kundera (escritor tcheco em A insustentável leveza do ser).*

## Agradecimentos

Primeiramente gostaria de agradecer a minha mãe (Mara) por todo amor e suporte durante toda minha vida e até o atual momento. Aos meus irmãos Marina, Daniel e Nicolas. Ao meu padastro (Antonio Carlos) e todos meus demais familiares. Também agradeço ao meu pai (Antonio) que foi peça fundamental nessa minha caminhada universitária desde os primeiros momentos em Belém do Pará, infelizmente você não verá o desfecho desta caminhada, mas com toda certeza, você faz parte dessa empreitada, obrigado por tudo.

Gostaria de agradecer aos bons amigos que a vida me proporcionou Johelen Marques, Raquel Aires, Lucas Camacho, Gabriel Aleixo, Lucas Bernar e Everton Luís, vocês foram fundamentais em vários momentos, pelas conversas e divagações profílicas sobre a vida, suas dificuldades e emoções. Agradeço aos amigos da comuna da 706 sul por sempre me receberem e me proporcionarem vários momentos de descontração, ideias e musicalidade. Também agradeço aos colegas de trabalho Everton Luís, José Solano, Moyses Fabiano, Rodrigo Ribeiro, Lidiane Ferreira, Lilah Fialho, Bruno Vieira, Nathália Coelho, Daniel Dourado, Felipe Rodrigues, Cristian Landri, Patrícia Carvalho e Carlos César por compartilharem bons momentos de reflexões científicas.

Agradeço ao meu orientador Dr. Annibal Figueiredo pela orientação, paciência e várias conversas frutíferas. Agradeço aos professores Tarcísio Marciano e Marcos Amato, pelos cursos ministrados e orientações sempre pertinentes. Agradeço também ao amigo e colega de trabalho Dr. Luciano Hugo Miranda Filho pelas discussões e colaborações importantes na elaboração deste trabalho. Agradeço ao programa de pós-graduação em física da Universidade Federal Rural de Pernambuco, por me acolherem em visita técnica em dezembro de 2018 (visita patrocinada com edital FAP-DF).

Je remercie particulièrement mon co-superviseur de thèse, Dr. Yves Elskens, pour m'avoir reçu à l'université d'Aix-Marseille, et d'avoir fait preuve d'un grand investissement dans son rôle de suivi et d'accompagnement durant mon parcours et notamment pour nos riches discussions, sa grande patience, sa disponibilité et cette amitié. J'ai une dette envers toi, une dette de gratitude. Je remercie également l'ami Damien Minema, pour toutes nos conversations, nos partages et ses conseils. Aussi, je remercie toute l'équipe de Turbulence Plasma, pour leur accueil chaleureux et pour m'avoir permis de me sentir comme chez moi. A mes amis de Marseille : Suzana Curti, Bruno Ribeiro, Simona Ramos, Jérôme, Luciana et Willian Amaral, je n'ai pas de mots pour l'exprimer, je veux juste vous dire, vous êtes inoubliables.

A mon grand amour, Sandrine Fernandes, je lui adresse tous mes mots de douceur, tous

mes mots de remerciement, toute mon affection. Je la remercie d'avoir été là chaque jour, à chaque instant, à chaque aller et retour, de m'avoir appris à patienter, et à voir la vie avec les yeux de l'amitié, fidélité et disponibilité. Merci pour tout ce que l'on a vécu. Je t'aime. Mes remerciements s'adressent également aux enfants les plus chouettes que je connais, Othilie et Pablo, vous êtes adorables et incroyables.

I would like to thanks the Startup Aitvt for lending me your good computer. This was very important to develop this work.

Agradeço a banca por sua disponibilidade em avaliar este trabalho.

Por fim agradeço a Universidade de Brasília por toda a estrutura cedida. Também agradeço a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal – CAPES pela suporte da bolsa de doutorado, como também agradeço a CAPES a oportunidade de fazer parte deste trabalho na cidade de Marselha – FR, por intermédio da bolsa de doutorado sanduíche (processo 88881.131521/2016-01).

# Sumário

Lista de algoritmos	x
Lista de figuras	xi
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Sistemas com interação de curto alcance</b>	<b>9</b>
2.1 Dinâmica de uma colisão binária . . . . .	12
2.1.1 Leis de conservação . . . . .	12
2.1.2 Velocidades assintóticas pós-colisionais . . . . .	14
2.2 Dinâmica molecular de colisões binárias . . . . .	16
2.2.1 Cálculo do tempo de colisão $t_{i,j}$ . . . . .	16
2.2.2 Método <i>event driven</i> . . . . .	19
<b>3 Sistemas com interação de longo alcance</b>	<b>20</b>
3.1 Modelo de folhas . . . . .	23
3.1.1 Modelo de folhas carregadas . . . . .	25
3.1.2 Dinâmica do modelo de folhas carregadas e integração numérica . . . . .	28
3.2 Modelo cosHMF . . . . .	35
3.2.1 Descrição do modelo cosHMF . . . . .	37
3.2.2 Implementação numérica do modelo cosHMF . . . . .	43
3.2.3 Resultado numéricos . . . . .	46
<b>4 Sistemas de curto e longo alcance</b>	<b>50</b>
4.1 Modelo cosHMF colisional . . . . .	53
4.2 Método numérico ao modelo cosHMF colisional . . . . .	54

---

<b>5</b>	<b>Resultados</b>	<b>57</b>
5.1	Medidas sobre o conjunto de partículas . . . . .	59
5.1.1	Espaço cinético e magnetização . . . . .	59
5.1.2	Termalização . . . . .	64
5.2	Medidas sobre uma partícula teste . . . . .	93
<b>6</b>	<b>Conclusões e perspectivas</b>	<b>96</b>
6.1	Conclusões . . . . .	96
6.2	Perspectivas . . . . .	98
<b>A</b>	<b>Métodos numéricos e códigos</b>	<b>100</b>
A.1	Modelo de Folhas . . . . .	100
A.1.1	Event driven otimizado . . . . .	101
A.1.2	Algoritmo e códigos implementados . . . . .	102
A.2	Modelo cosHMF . . . . .	109
A.2.1	Algoritmo e códigos implementados . . . . .	110
A.2.2	Verificação do algoritmo . . . . .	112
A.3	Modelo cosHMF colisional . . . . .	113
A.3.1	Algoritmo e códigos implementados . . . . .	115
A.3.2	Verificação do Algoritmo . . . . .	124
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>125</b>

# Lista de Algoritmos

1	Modelo de folhas . . . . .	103
2	Modelo cosHMF . . . . .	110
3	Modelo cosHMF colisional . . . . .	114

# Lista de Figuras

1.1	Representação da esfera com distribuição homogênea de partículas, com uma única partícula localizada no centro da esfera. Sendo $R$ o raio da esfera maior e $\delta$ o da esfera menor. . . . .	2
1.2	Ilustração das diferenças de propriedades físicas entre os SCA e os SLA. . . . .	6
2.1	Representação da condição de colisão dado um passo $\Delta t$ . . . . .	17
3.1	Representação dos estágios do processo dinâmico de SLA. . . . .	21
3.2	Representação do modelo de folhas gravitacionais . . . . .	24
3.3	Representação do campo elétrico Coulombiano. . . . .	26
3.4	Representação periódica do campo elétrico para o sistema periódico de tamanho $2L$ com uma carga $q_i = 1$ . . . . .	26
3.5	Representação esquemática do círculo onde ocorre a dinâmica devido a escolha de um sistema periódico. Na figura temos a representação da partícula $i$ e de seu fantasma correspondente assinalado pela linha pontilhada. . . . .	27
3.6	Representação da posição versus tempo do modelo de folhas com cruzamento. (a) dinâmica atrativa $\epsilon = 1$ . (b) dinâmica repulsiva $\epsilon = -1$ . Tempo total $t = 1$ , passo numérico $h = 0.01$ , carga $q = 1$ e massa $m = 1$ . Os círculos representam as partículas reais e em estrelas temos as partículas fantasmas. Sistema composto por 4 partículas reais e seus respectivos fantasmas. . . . .	31
3.7	Evolução temporal da posição ao modelo de folhas carregadas com colisões. (a) dinâmica atrativa. (b) dinâmica repulsiva. Simulação realizada com $N = 4$ partículas reais e seus respectivos fantasmas, tempo total $t = 10$ e passo numérico $h = 0.01$ . As linhas contínuas representam as partículas reais e as pontilhadas os fantasmas correspondentes. . . . .	32

3.8	Representação do EC para o modelo de folhas. Em (a) sistema no instante $t = 0$ . Em (b), (c) e (d) o sistema se encontra no processo de RV para os instantes $t = 5$ , $t = 10$ e $t = 15$ . Em (e) o sistema se encontra nos EQE para o instante $t = 100$ . Simulação realizada com $N = 1000$ . . . . .	34
3.9	Representação do RM com interação de $N$ partículas sobre o anel, com $\theta_{i,j}$ sendo a diferença relativa entre as partículas $i$ e $j$ e $R$ o raio unitário. . . . .	35
3.10	Distribuição inicial waterbag, sistema composto por $N = 10000$ partículas e energia inicial $U \simeq 0.3$ . Nesta distribuição foi escolhido um $\Delta\theta$ próximo de 0. Devido a esta distribuição homogênea temos um alto valor de magnetização $M = 0.98$ . . . . .	45
3.11	Ilustração método leapfrog para ao modelo cosHMF. Em azul destacamos os meios passos dado a posição de cada partícula, em vermelho destacamos o passo completo ao momento, que varia sob influência de uma força de longo alcance. . . . .	46
3.12	Representação do espaço cinético do sistema cosHMF no EQE e da energia individual por partícula pela posição. (a) e (b) sistema com energia $U = 0.3$ . (c) e (d) sistema com energia $U = 0.5$ . (e) e (f) sistema com energia $U = 0.69$ . Sistema composto por $N = 10000$ partículas, magnetização inicial de $M = 0.98$ e um tempo total $t = 500$ . As linhas em azul e preto representam a energia da separatriz. . . . .	48
3.13	Representação da magnetização pelo tempo. Observamos a relaxação violenta no início do processo dinâmico e o início dos EQE. Simulação feita com $N = 10000$ , tempo total $t = 500$ e magnetização inicial $M = 0.98$ . Foram escolhidos sistemas com energias $U = 0.3$ , $U = 0.5$ e $U = 0.69$ . . . . .	49
4.1	Esquematização do algoritmo implementado para o cálculo do sistema cosHMF colisional para partículas de massas diferentes, em azul partícula mais leve, em vermelha partícula mais pesada. Nas figuras (a) temos a presença da força de longo alcance. Nas figuras (b), (c) e (d) temos a presença da força de curto alcance e da dinâmica colisional. Após se retorna ao item (a) para realizar uma observação completa no tempo. . . . .	56

5.1	Representação do espaço cinético e da energia individual de cada partícula pela posição dos modelos cosHMF e cosHMF colisional para energia $U = 0.3$ . (a) e (b) sistema cosHMF. (c) e (d) sistema cosHMF colisional. Simulação com $N = 2000$ partículas, sendo 200 partículas de massa $m = 5$ , tempo de simulação $t = 500$ . . . . .	60
5.2	Representação do espaço cinético e da energia individual de cada partícula pela posição dos modelos cosHMF e cosHMF colisional para energia $U = 0.69$ . (a) e (b) sistema cosHMF. (c) e (d) sistema cosHMF colisional. Simulação com $N = 2000$ partículas, sendo 200 partículas de massa $m = 5$ , tempo de simulação $t = 500$ . . . . .	61
5.3	Representação do vetor magnetização <i>verus</i> o tempo. (a) Sistema de energia $U = 0.3$ . (b): Sistema de energia $U = 0.5$ . (c): Sistema com energia $U = 0.69$ . Simulações realizadas com $N = 2000$ partículas, sendo 200 partículas com massa $m = 5$ , tempo total de simulação $t = 500$ . . . . .	63
5.4	Curtoses pelo tempo aos sistemas (a) colisional, (b) cosHMF e cosHMF colisional. Energia $U = 0.69$ , $N = 3000$ partículas com massas iguais. Tempo total de simulação $t = 1 \times 10^4$ . . . . .	65
5.5	Curtoses pelo tempo aos sistemas (a) colisional, (b) cosHMF e cosHMF colisional. Energia $U = 1.5$ , $N = 3000$ partículas com massas iguais. Tempo total de simulação $t = 1 \times 10^4$ . . . . .	66
5.6	Curtoses pelo tempo aos sistemas (a) colisional, (b) cosHMF e (c) cosHMF colisional. Energia $U = 0.69$ , $N = 3000$ partículas com única partícula de massa $m = 5$ . Tempo total de simulação $t = 1 \times 10^4$ . . . . .	68
5.7	Curtoses pelo tempo aos sistemas (a) colisional, (b) cosHMF e (c) cosHMF colisional. Energia $U = 1.5$ , $N = 3000$ partículas com única partícula de massa $m = 5$ . Tempo total de simulação $t = 1 \times 10^4$ . . . . .	70
5.8	Representação da curtoses pelo tempo para o sistema colisional. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para $N = 3000$ partículas sendo 30 com massa $m = 5$ . Energia do sistema $U = 0.69$ e tempo total de simulação $t = 1 \times 10^4$ . . . . .	72
5.9	Representação da curtoses pelo tempo para o sistema cosHMF. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para $N = 3000$ partículas sendo 30 com massa $m = 5$ . Energia do sistema $U = 0.69$ e tempo total de simulação $t = 1 \times 10^4$ . . . . .	73

- 5.10 Representação da curtoses pelo tempo para o sistema cosHMF colisional. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para  $N = 3000$  partículas sendo 30 com massa  $m = 5$ . Energia do sistema  $U = 0.69$  e tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ . 74
- 5.11 Representação da curtoses pelo tempo para o sistema colisional. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para  $N = 3000$  partículas sendo 30 com massa  $m = 5$ . Energia do sistema  $U = 1.5$  e tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ . . . . 75
- 5.12 Representação da curtoses pelo tempo para o sistema cosHMF. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para  $N = 3000$  partículas sendo 30 com massa  $m = 5$ . Energia do sistema  $U = 1.5$  e tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ . . . . 76
- 5.13 Representação da curtoses pelo tempo para o sistema cosHMF colisional. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para  $N = 3000$  partículas sendo 30 com massa  $m = 5$ . Energia do sistema  $U = 1.5$  e tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ . 77
- 5.14 Representação da curtoses pelo tempo para o sistema colisional. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para  $N = 3000$  partículas sendo 300 com massa  $m = 5$ . Energia do sistema  $U = 0.69$  e tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ . . . . 80
- 5.15 Representação da curtoses pelo tempo para o sistema cosHMF. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para  $N = 3000$  partículas sendo 30 com massa  $m = 5$ . Energia do sistema  $U = 1.5$  e tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ . . . . 81
- 5.16 Representação da curtoses pelo tempo para o sistema cosHMF colisional. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para  $N = 3000$  partículas sendo 300 com massa  $m = 5$ . Energia do sistema  $U = 0.69$  e tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ . 82
- 5.17 Representação da curtoses pelo tempo para o sistema colisional. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para  $N = 3000$  partículas sendo 300 com massa  $m = 5$ . Energia do sistema  $U = 1.5$  e tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ . . . . 83

5.18	Representação da curtoses pelo tempo para o sistema cosHMF. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para $N = 3000$ partículas sendo 30 com massa $m = 5$ . Energia do sistema $U = 1.5$ e tempo total de simulação $t = 1 \times 10^4$ . . . .	84
5.19	Representação da curtoses pelo tempo para o sistema cosHMF colisional. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para $N = 3000$ partículas sendo 300 com massa $m = 5$ . Energia do sistema $U = 1.5$ e tempo total de simulação $t = 1 \times 10^4$ . . . .	85
5.20	Curtoses pelo tempo aos sistemas (a) colisional, (b) cosHMF e (c) cosHMF colisional. Energia $U = 0.69$ , $N = 3000$ , sendo 750 partículas de massa $m = 5$ . Tempo total de simulação $t = 1 \times 10^4$ . . . . .	87
5.21	Curtoses pelo tempo aos sistemas (a) colisional, (b) cosHMF e (c) cosHMF colisional. Energia $U = 1.5$ , $N = 3000$ , sendo 750 partículas de massa $m = 5$ . Tempo total de simulação $t = 1 \times 10^4$ . . . . .	89
5.22	Curtoses pelo tempo aos sistemas (a) colisional, (b) cosHMF e (c) cosHMF colisional. Energia $U = 0.69$ , $N = 3000$ , sendo 1500 partículas de massa $m = 5$ . Tempo total de simulação $t = 1 \times 10^4$ . . . . .	90
5.23	Curtoses pelo tempo aos sistemas (a) colisional, (b) cosHMF e (c) cosHMF colisional. Energia $U = 1.5$ , $N = 3000$ , sendo 1500 partículas de massa $m = 5$ . Tempo total de simulação $t = 1 \times 10^4$ . . . . .	92
5.24	Representação da curtoses de uma partícula teste. Em preto partículas de massa $m = 5$ em vermelho $m = 5$ . (a) e (b) sistema colisional. (c) e (d) sistema cosHMF. (e) (f) sistema cosHMF colisional. Simulação realizada com 500 repetições, com $N = 3000$ , tempo de simulação $t = 1 \times 10^2$ . . . . .	95
6.1	Comparação dos resultados obtidos. (a) sistema colisional. (b) sistema cosHMF. (c) sistema cosHMF colisional. Simulação realizada com $N = 3000$ , tempo de simulação $t = 1 \times 10^2$ e energia $U = 0.69$ . . . . .	97
A.1	Ilustração do cálculo entre do tempo de colisão entre partículas que colidem. Após primeira colisão calcularemos apenas os próximos tempo de colisão para as partículas à esquerda e direita de $i$ e $i + 1$ , respectivamente. . . . .	102

---

A.2	Representação do sistema indo de $-L$ até $L$ , onde inserimos as partículas reais e seus fantasmas, em azul e vermelho, respectivamente. . . . .	106
A.3	Evolução da energia total (linha preta), energia cinética (linha azul) e energia potencial (linha vermelha) pelo tempo. Na figura (a) energia total de $U = 0.3$ e figura (b) $U = 0.69$ . Em todas as simulações realizadas referentes ao sistema <i>cosHMF</i> , utilizamos um passo numérico $h = 0.001$ . Sistema composto por $N = 10000$ e tempo final $t = 500$ . . . . .	113
A.4	Gráfico da evolução da energia total (cinza), cinética (azul) e potencial (vermelha) pelo tempo. Simulação realizada com $N = 2000$ sendo 200 com massa $m = 5$ , tempo total de $t = 500$ e energia $U \simeq 0.5$ . (a) Sistema <i>cosHMF</i> sem colisões. (b) Sistema <i>cosHMF</i> com colisões. . . . .	124

# Capítulo 1

## Introdução

Quando há interações entre componentes elementares da matéria, tais interações podem ser classificadas de acordo com as características do potencial que descreverá a interação entre dois corpos. Portanto, quando consideramos potenciais que decaem para grandes distâncias como  $V(r) \sim 1/r^\alpha$ , podemos ter dois tipos de interações: *curto e longo alcance* [1]. Desta forma, apresentamos a definição de ambas as interações, que são presentes em vários sistemas estudados pela mecânica estatística e termodinâmica.

### Definição das interações de curto e longo alcance

Para definirmos a natureza das interações de curto e longo alcance entre partículas, calcularemos a energia potencial  $u$  de uma partícula em determinada esfera de raio  $R$ , sendo que as demais partículas estão distribuídas de maneira homogênea na esfera, de acordo com a figura 1.1. Para longas distâncias, dizemos que o potencial de interação entre pares decai como

$$V(r) = \frac{I}{r^\alpha}, \quad (1.1)$$

onde  $I$  e  $\alpha$  são termos constantes e  $r$  é a distância dada entre as partículas. Analisando a região para curtas distâncias na figura 1.1 onde  $r < \delta$ , excluiríamos a contribuição dessa região, com o

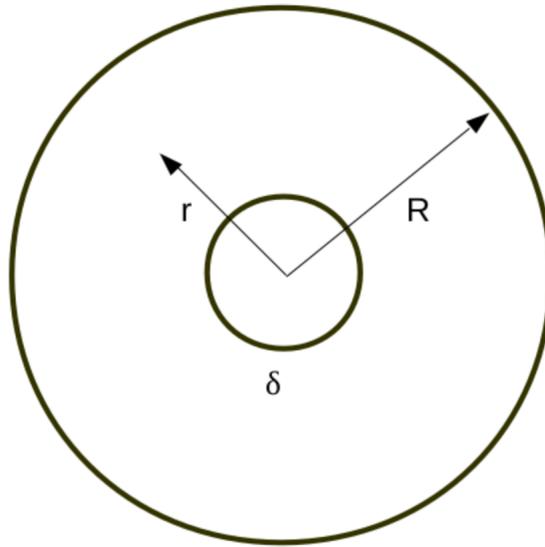


Figura 1.1: Representação da esfera com distribuição homogênea de partículas, com uma única partícula localizada no centro da esfera. Sendo  $R$  o raio da esfera maior e  $\delta$  o da esfera menor.

objetivo de evitar divergência para curtas distância. Considerando  $d$  dimensões temos que

$$\begin{aligned}
 u &= \int_{\delta}^R \rho \frac{I}{r^{\alpha}} d^d r \\
 &= \rho I \Omega_d \int_{\delta}^R r^{d-1-\alpha} d^d r \\
 &= \frac{\rho I \Omega_d}{d-\alpha} r^{d-\alpha} \Big|_{\delta}^R.
 \end{aligned}$$

Aplicando os limites de integração obtemos o valor da energia potencial. Para este resultado consideramos somente o caso em que  $\alpha \neq d$ , assim escrevemos a energia como

$$u = \frac{\rho I \Omega_d}{d-\alpha} \left[ R^{d-\alpha} - \delta^{d-\alpha} \right]. \quad (1.2)$$

Na equação (1.2),  $\rho$  representa a densidade e  $\Omega_d$  o volume angular dado em  $d$  dimensões. Para o caso quando consideramos  $\alpha = d$ , a integração para obter a energia assume a seguinte forma

$$\begin{aligned}
 u &= \int_{\delta}^R \rho \frac{I}{r^{\alpha}} d^d r \\
 &= \rho I \Omega_d \int_{\delta}^R r^{-1} d^d r \\
 &= \rho I \Omega_d \ln \frac{r}{c} \Big|_{\delta}^R,
 \end{aligned}$$

portanto, a energia potencial para o caso em que  $\alpha = d$  será

$$u = \rho I \Omega_d \ln \left( \frac{R}{\delta} \right). \quad (1.3)$$

Os resultados das equações (1.2) e (1.3) nos possibilita escrever

$$u = \begin{cases} \frac{\rho I \Omega_d}{d-\alpha} [R^{d-\alpha} - \delta^{d-\alpha}] & \alpha \neq d \\ \rho I \Omega_d \ln \left( \frac{R}{\delta} \right) & \alpha = d \end{cases}. \quad (1.4)$$

Das situações expostas na equação (1.4) definimos as interações de curto e longo alcance. Quando consideramos  $\alpha > d$  a energia potencial por partícula se torna finita para  $R \rightarrow \infty$  e a energia total do sistema cresce linearmente com o volume do sistema, assim definimos as interações de curto alcance. Sistemas caracterizados por tal potencial são ditos como *sistemas de curto alcance – SCA*.

Por outro lado na equação 1.4 quando consideramos  $\alpha \leq d$ , a energia potencial por partícula divergirá quando  $R \rightarrow \infty$ , com a energia total do sistema crescendo superlinearmente com o volume do sistema, caracterizando as interações de longo alcance, que definem os *sistemas de longo alcance – SLA*. Adotamos tal definição pelo fato de que no limite onde consideramos o número dos constituintes  $N$  muito grande, conseguimos distinguir de maneira clara as diferenças físicas e matemáticas entre os dois tipos de sistemas.

## Termodinâmica e estatística de SCA e SLA

No estudo da termodinâmica e mecânica estatística muitos sistemas envolvem os potenciais de curto e longo alcance. Portanto, a diferença na definição dos dois tipos de interações faz com que propriedades termodinâmicas e estatísticas dos SCA e SLA se difiram. Por exemplo, à nível termodinâmico buscamos sempre verificar os conceitos de *extensividade* e *aditividade*, os SLA são caracterizados por não apresentarem tais propriedades. Quando analisamos a energia  $U(N)$  em SLA, o potencial é escalonado com  $N^2$ , sendo a energia *não-extensiva*.

O problema da não-extensividade para SLA foi solucionado pela prescrição de Kac [2]. Porém, o sistema continua sendo *não-aditivo*, o que traz diferenças enormes com os SCA. A falta de aditividade implica o surgimento de *calor específico negativo*, no ensemble microcanônico. O que é razoável, pois a concavidade do calor específico é garantida pela aditividade do sistema. Porém,

o mesmo resultado não se observa no ensemble canônico, o que resulta na não equivalência de ensembles, conceito contrário a estatística tradicional.

Em mecânica estatística um conceito fundamental é a Ergodicidade. Quando Boltzmann propõe a hipótese da equiprobabilidade dos microestados de um sistema, ele parte da consideração que o sistema é ergódico. Para tal definição pensamos o seguinte, um espaço de fase com  $2dN$  dimensões, sendo  $d$  a dimensão do sistema e  $N$  o número de partículas, onde cada ponto desse conjunto é considerado um possível microestado do sistema. A hipótese ergódica é bem verificada em SCA, mas não se mostra evidente em SLA.

Outro ponto bastante interessante quando analisamos os dois tipos de interações é a relaxação para o equilíbrio termodinâmico. Percebemos claramente esta diferença quando analisamos a equação de Boltzmann para teoria cinética dos gases, escrita como

$$\frac{Df}{Dt} \equiv \frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mathbf{v}f) + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot \left( \frac{\mathbf{F}}{m} f \right) = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{col}. \quad (1.5)$$

Sendo  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  a função de distribuição e a força dada como  $\mathbf{F} = \dot{\mathbf{p}}$ . O primeiro termo da equação (1.5) é denominada de derivada conectiva de  $f$ . No caso dos SCA, a relaxação do sistema é dita colisional com a correlação entre partículas bem definida, representada pelo último termo da equação (1.5). Quanto à solução da equação de Boltzmann no equilíbrio, obtemos  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  obedecendo a distribuição de Maxwell-Boltzmann. Portanto, todos sistemas que possuem distribuição  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  como Maxwell-Boltzmann são considerados sistemas em equilíbrio termodinâmico.

Já os SLA relaxam para o equilíbrio termodinâmico de forma diferente. Quando analisada a correlação entre as partículas com o termo de relaxação colisional, que escala de acordo com prescrição de Kac  $1/N$  [2], se adotado o limite termodinâmico  $N \rightarrow \infty$  a correlação entre as partículas é completamente desprezíveis. Desta forma, uma melhor análise dos SLA é feito por intermédio da equação de Vlasov, definida como  $Df/Dt = 0$ .

À vista disso, a equação de Vlasov possui uma gama infinita de soluções estacionárias, diferentemente dos SCA que sempre convergem a uma distribuição Maxwell-Boltzmann, o que caracteriza SLA como não termodinâmicos. Em escalas microscópicas  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  evolui de maneira infinita, com distribuições de baixa amplitude. No regime macroscópico a dinâmica de Vlasov permite que um sistema de longo alcance obtenha soluções estacionárias. Quando  $N$  é finito a correlação entre as partículas se torna considerável, contribuindo com a dinâmica e a

relaxação termodinâmica, como no caso da relaxação colisional. Porém, o tempo de relaxação é escalonado de acordo com  $N^\gamma$ . O expoente  $\gamma$  é definido pelo tipo de interação.

Desta forma, a relaxação de SLA de longo alcance acontece em dois estágios, o primeiro a relaxação não-colisional, seguido por uma relaxação colisional, com tempo de duração muitíssimo maior que a primeira relaxação. Por outro lado, quando consideremos os limites  $N \rightarrow \infty$  e  $t \rightarrow \infty$ , o segundo processo de relaxação dos SLA nunca é alcançado devido não haver correlação entre as partículas do sistema. Portanto, o objetivo dessa tese reside nas diferenças entre os dois tipos de sistemas.

## Objetivos

Conhecido que os SCA e SLA possuem propriedades termodinâmicas e estatísticas diferentes, ilustramos de forma pictóricas tais diferenças por intermédio da figura 1.2.

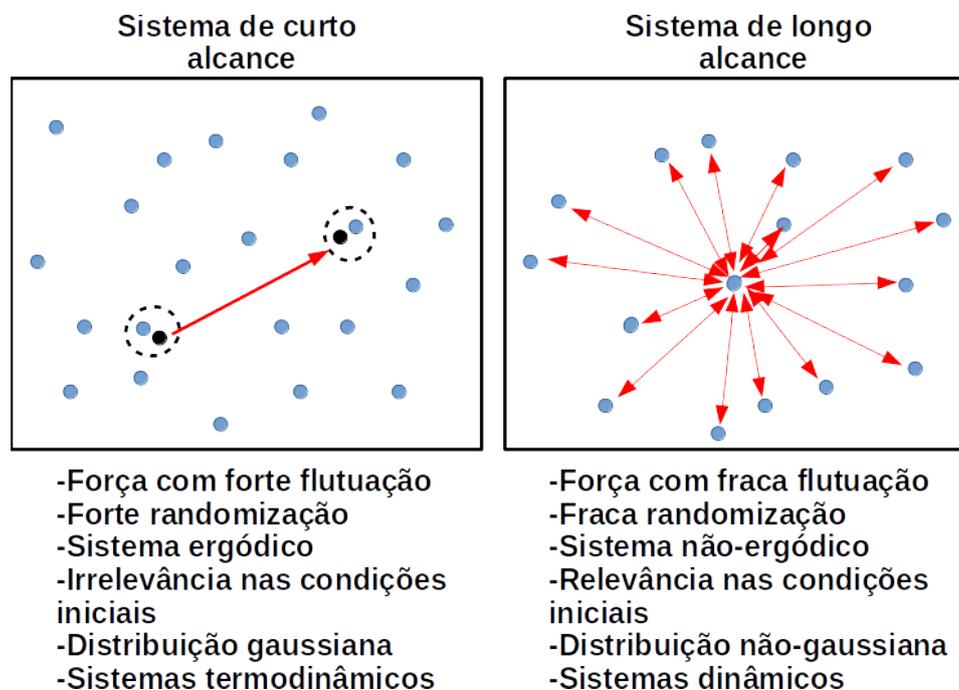


Figura 1.2: Ilustração das diferenças de propriedades físicas entre os SCA e os SLA.

Uma vez que conhecemos os comportamentos estatísticos e termodinâmicos de sistemas de curto e longo alcance, podemos fazer a seguinte indagação: *como se comportaria um sistema hamiltoniano clássico em que suas partículas tivessem a influência tanto de forças de curto e longo alcance?*

A pergunta lançada será a motivação base desta tese. Podemos imaginar duas situações, um sistema em que temos um potencial de curto alcance, onde as partículas sofrem a influência da interação de longo alcance, ou situação opostas, um sistema de características de longo alcance sob influência de curto alcance. Para esta tese propomos o seguinte: consideraremos o modelo cosHMF, onde as partículas interagem em um campo médio (força de longo alcance), com dinâmica delimitada a um círculo unitário (esse modelo será detalhado no capítulo 3), porém, consideraremos que as partículas durante o período dinâmico sofrerá efeitos colisionais (força de curto alcance).

Portanto, colocamos como objetivo inicial deste trabalho o que chamamos de *Rota para o equilíbrio termodinâmico*. Como foi dito, sistemas de longo alcance não obedecem à estatística

de Maxwell-Boltzmann quando se considera o limite termodinâmico, não atingindo o equilíbrio termodinâmico. Por outro lado, os sistemas colisionais operam de maneira oposta. Desta forma, a primeira etapa será a busca de informações sobre o equilíbrio desse sistema proposto. À vista disso, impomos a pergunta: *qual será a rota para o equilíbrio termodinâmico deste sistema misto proposto por esta tese?*

Ademais, tal modelo sugere outras perguntas, como exemplo, *qual potencial que prevalecerá sobre o outro? A estatística ao se considerar o longo e curto alcance juntos seguirá os padrões de uma estatística tradicional ou não tradicional (SLA)? A questão da ergodicidade será verificada? A termodinâmica será a usual ou a que se apresenta aos SLA?* Portanto, entender essas questões mais elementares são alguns dos desafios deste trabalho. Ainda não se conhece na literatura sistema parecido, um misto do sistema cosHMF com efeitos colisionais, desta forma, propomos um *novo método numérico* como meio de resolução.

## Estruturação da tese

Esta tese está estruturada da seguinte maneira, no capítulo 2 apresentaremos uma descrição geral dos SCA, onde alguns aspectos importantes são abordados, como a descrição de uma colisão binária e do método numérico *event driven*. No capítulo 3 discutiremos os aspectos gerais dos SLA e estudaremos dois sistemas com interação de longo alcance, o modelo de *folhas carregadas* e o modelo *cosHMF*. Apresentaremos descrições analíticas e numéricas para ambos os modelos.

No capítulo 4 é feita a descrição geral de sistemas mistos, isto é, sistemas com interações de curto e longo alcance. É também neste capítulo que apresentamos a construção física do modelo que propomos, o sistema *cosHMF colisional*, além da apresentação do *novo método numérico* que possibilita o cálculo deste novo sistema misto, sendo o primeiro resultado original deste trabalho.

No capítulo 5 estão os novos resultados desta tese. Primeiro apresentaremos a análise do espaço cinético dos modelos cosHMF e cosHMF colisional, com intuito de verificar as possíveis mudanças do espaço cinético quando acrescido colisões ao modelo cosHMF. Uma segunda análise apresentada é o estudo da termalização dos sistemas, onde por intermédio da curtoses fazemos o estudo numérico das distribuições de velocidades dos sistemas analisados. Em seguida fazemos a mesma análise às partículas testes de cada sistema.

Por fim, no capítulo 6 apresentamos as conclusões dos resultados deste trabalho. Todos os algoritmos e códigos utilizados para obter os resultados são apresentados nos apêndices. Res-

saltamos também que todas as figuras e gráficos apresentados foram feitos pelo autor desta tese.

# Capítulo 2

## Sistemas com interação de curto alcance

Como vimos na introdução deste trabalho, descrevemos a interação de um sistema de acordo com o potencial  $V(r) \sim 1/r^\alpha$  [1], se adotamos que  $\alpha > d$ , sendo  $d$  a dimensão do sistema, definimos os *sistemas de curto alcance* – SCA. Por outro lado, quando consideramos que  $\alpha \leq d$ , definimos os *sistemas de longo alcance* – SLA. Portanto, apesar de terem definições semelhantes, tais sistemas apresentam enormes diferenças entre si. Neste capítulo nos dedicaremos aos SCA.

Os SCA são caracterizados por sua localidade, ou seja, cada elemento do sistema interage somente com sua vizinhança, diferentemente dos SLA. Referente aos conceitos fundamentais das teorias termodinâmica e estatística, os SCA se fazem interessantes, pois são verificadas as predições de tais teorias. Por exemplo, a nível termodinâmico, os conceitos de extensividade e aditividade são respeitados.

Dizemos que um sistema é extensivo quando consideramos um número de partículas  $N$  em um volume  $V$  são dimensionados por  $\lambda$ , sendo assim, a energia interna do sistema  $U(\lambda N, \lambda V)$  é escalonada como  $\lambda U(N, V)$  [3]. Desta forma, se supormos um potencial de interação com alcance linear  $\gamma$ , o número de partículas confinadas na região de alcance será proporcional a  $N\gamma^d/V$ , sendo  $d$  a dimensão do sistema. A energia interna do sistema será escrita da forma  $U(N, V) = Nf(N/V)$ , sendo extensiva e com a função  $f(x)$  para relatar as interações microscópicas entre as partículas. Portanto, dada a definição dos SCA, dizemos que tais sistemas são extensivos.

A aditividade em SCA é garantida quando consideramos que a energia das interfaces entre os subsistemas macroscópicos é escalonado pelo número de partículas, seguindo  $N^{(d-1)/d}$ , com

$d$  representando a dimensão do sistema, já a energia do sistema é escalonada linearmente com o número de partículas  $N$  [3]. No entanto, se considerado o limite termodinâmico, podemos esperar que a energia das interfaces podem ser desprezadas em respeito a energia do sistema, com isso, a energia total se iguala a soma das energias internas dos subsistemas, garantindo um sistema aditivo.

No que concerne as propriedades estatísticas, os SCA são considerados sistemas estatisticamente termodinâmicos, isto é, possuem uma dinâmica com rápida convergência à distribuição de Maxwell-Boltzmann devido a alta correlação entre as partículas do sistema. Esta alta correlação é diretamente ligada ao fato que SCA são basicamente sistemas colisionais (descontinuidade no potencial de interação), ou sistemas onde a força entre pares é suficientemente forte para mudar a quantidade de movimento entre duas partículas a curta distância.

Desta forma, alguns dos principais conceitos apresentados pela mecânica estatística, como a equivalência de ensemble e a teoria da ergodicidade são sempre verificados em tais sistemas. Isso é sempre visto, pois em uma análise primária de sistemas de muitos corpos, parte de mecânica estatística foi construída com base em sistemas colisionais, partindo de uma teoria cinética, proposta inicialmente por Boltzmann. Portanto, dizemos de maneira geral que os SCA seguem uma mecânica estatística tradicional.

De modo geral SCA são sistemas de forças repulsivas e SLA são sistemas de força atrativa. Exemplos de SCA podem ser encontrados no estudo de sistemas atômicos moleculares, como também na Física nuclear [4]. Também se insere na classificação todo e qualquer sistema de colisão [5], além do conhecido modelo de Ising com interação entre vizinhos [6] e outros modelos.

Em Física um exemplo de sistema de curto alcance bastante conhecido é dado pelo potencial de Lennard-Jones, onde descrevemos a interação entre par de átomos neutros ou moléculas quando sujeito a duas forças distintas, escrevemos o potencial como

$$\Phi(r_{ij}) = \frac{A_{ij}}{r_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{r_{ij}^6}.$$

No potencial o termo  $1/r_{i,j}^{12}$  representa força repulsiva e  $1/r_{i,j}^6$  força atrativa de curto alcance, sendo  $A_{i,j}$  e  $B_{i,j}$  parâmetros atrativos e repulsivos, respectivamente [4].

Outro exemplo de um potencial de curto alcance é o modelo de *potenciais de centros de*

*repulsão*, cuja função potencial descrita como

$$\Phi(r) = \frac{\kappa}{\nu - 1} \frac{1}{r^{\nu-1}}, \quad \kappa > 0, \quad \nu > 1,$$

Quando considerado que  $\nu = 5$ , dizemos que tal potencial é maxwelliano e o conjunto de partículas sob influência deste potencial são chamadas partículas maxwellianas.

Também se insere em SCA o caso dos sistemas granulares. Tais sistemas são constituídos por um aglomerado robusto de partículas discretas, sendo que o sistema se caracteriza pelo modo como suas partículas interagem, ou seja, mediadas por forças dissipativas e enormemente repulsivas (colisões) [5]. A origem dissipativa do sistema associa-se as forças de fricção como também a inelasticidade das colisões. Os sistemas granulares apresentam peculiaridades bastantes interessantes, por apresentar características que se assemelham a materiais sólidos, líquidos e gasosos.

No entanto, esses sistemas também fogem das características elementares dos materiais citados acima, como exemplo, na medida em que seus fenômenos ocorrem, não esperamos que os efeitos seja diretamente atrelados a constituição material de cada grão, por consequência, o conceito de temperatura não exerce relevância sobre o sistema. Outros aspectos relevantes sobre tais sistemas são encontrados nas seguintes obras [5, 7, 8].

## 2.1 Dinâmica de uma colisão binária

Como visto, sistemas sob influências de colisões são caracterizados por uma força de curto alcance. À vista disso, um bom entendimento de um sistema de curto alcance compreende o entendimento do processo de colisão entre partículas. Desta forma, quando analisamos um gás rarefeito a possibilidade de haver uma colisão ternária ou quaternária e assim por diante é quase nula, havendo basicamente apenas colisões binárias. Portanto, podemos nos restringir a análise de colisões binárias no estudo de um gás rarefeito [9].

### 2.1.1 Leis de conservação

Consideraremos uma colisão entre duas partículas com massa  $m$  e eletricamente neutras em um gás monoatômico e rarefeito. Ao admitir que durante o instante da colisão as partículas não estarão sob influência de uma força externa, podemos escrever as equações de movimento ao par que colide da seguinte maneira

$$m\ddot{\mathbf{r}}^1 = -\frac{\partial\Phi(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}^1}, \quad m\ddot{\mathbf{r}}^2 = -\frac{\partial\Phi(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}^2} = \frac{\partial\Phi(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}^1}. \quad (2.1)$$

Em (2.1)  $\mathbf{r}^1$  e  $\mathbf{r}^2$  são os vetores posição às duas partículas. Ademais, definimos  $\mathbf{r} = \mathbf{r}^2 - \mathbf{r}^1$  como o vetor posição relativa, sendo  $r$  o seu módulo. O potencial de interação  $\Phi(\mathbf{r})$  é considerado simetricamente esférico, com o seu domínio sendo limitado como

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \Phi(\mathbf{r}) = 0. \quad (2.2)$$

Escreveremos as velocidades assintóticas pré-colisionais como  $(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1)$  e as velocidades assintóticas pós-colisionais  $(\mathbf{v}^*, \mathbf{v}_1^*)$ . O subíndice que apresentamos é utilizado para diferenciar as partículas que colidem. Ademais, definimos as velocidades relativas pré-colisionais e pós-colisionais como

$$\begin{aligned} \mathbf{g} &= \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}, \\ \mathbf{g}^* &= \mathbf{v}_1^* - \mathbf{v}^*. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Para obter a lei de conservação do momento linear é necessário somar as duas equações

apresentadas em (2.1), chegamos em

$$m\ddot{r}^1 + m\ddot{r}^2 = 0, \quad (2.4)$$

uma vez conhecida (2.4), basta realizarmos a integração direta das equações e obtemos facilmente a lei de conservação do momento, que em função das velocidades assintóticas pré e pós-colisionais é dada por

$$m\mathbf{v} + m\mathbf{v}_1 = m\mathbf{v}^* + m\mathbf{v}_1^*. \quad (2.5)$$

Para obter a lei de conservação da energia e do momento angular multiplicaremos  $1/m$  em (2.1), obtendo

$$\dot{r}^1 = -\frac{1}{m} \frac{\partial \Phi(\mathbf{r})}{\partial r},$$

e em seguida subtrairemos  $1/m$  e obtemos

$$\mu\ddot{\mathbf{r}} = -\frac{\partial \Phi \mathbf{r}}{\partial r r}, \quad (2.6)$$

sendo  $\mu = m/2$  a massa reduzida das partículas. Quando realizamos a multiplicação escalar de  $\dot{\mathbf{r}}$  em (2.6) é obtido

$$\frac{d}{dt} \left[ \frac{\mu}{2} \dot{\mathbf{r}}^2 + \Phi(\mathbf{r}) \right] = 0. \quad (2.7)$$

Por outro lado se realizamos a multiplicação vetorial de  $\mathbf{r}$  em (2.6), chegamos na relação

$$\frac{d}{dt} [\mu \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{r}] = 0. \quad (2.8)$$

sendo as equações (2.7) e (2.8) as leis de conservação da energia e do momento angular. Quando realizamos a integração direta de (2.7) e consideramos a condição dada por (2.2) obtemos o módulo das velocidades relativas assintóticas pré e pós-colisionais, escrito como

$$g = g^*. \quad (2.9)$$

Com base na equação (2.5) reescrevemos (2.9) como

$$\frac{1}{2}m\mathbf{v} + \frac{1}{2}m\mathbf{v}_1 = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^* + \frac{1}{2}m\mathbf{v}_1^*. \quad (2.10)$$

Quando realizamos a integração direta da lei de conservação do momento angular (2.8) chegamos na expressão

$$\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{r} = \text{const.}, \quad (2.11)$$

desta maneira, podemos concluir pela equação (2.11) que a dinâmica de colisão está restrita a um plano. Portanto, se consideramos a projeção de um vetor  $\mathbf{r}$  antes da colisão sendo perpendicular a um vetor  $\mathbf{g}$  e se consideramos também um vetor  $\mathbf{r}^*$  após a colisão projetado perpendicularmente a um vetor  $\mathbf{g}^*$ , denotamos o parâmetro de colisão  $b$  e  $b^*$ . Com auxílio da equação (2.11) podemos escrever uma equação para relacionar os parâmetros de colisão, dada como

$$gb\mathbf{n} = g^*b^*\mathbf{n}. \quad (2.12)$$

Sendo  $\mathbf{n}$  o vetor unitário perpendicular ao plano do movimento relativo das partículas. Da mesma forma que a equação (2.9) que nos fornece  $g = g^*$ , podemos concluir que  $b = b^*$  a partir da equação (2.12).

Com a integração direta das equações (2.5) e (2.10) conseguimos obter apenas quatro equações escalares por considerar um sistema unidimensional. Para obter informação completa da dinâmica de uma colisão binária, é necessária uma expressão às equações  $\mathbf{v}^*$  e  $\mathbf{v}_1^*$  em função de suas respectivas velocidades pré-colisionais. Desta forma, para uma descrição completa, é necessário a definição de um vetor de colisão, como veremos a seguir.

### 2.1.2 Velocidades assintóticas pós-colisionais

Definiremos o vetor colisão  $\mathbf{k}$  da seguinte maneira

$$\mathbf{k} = \frac{\mathbf{g} - \mathbf{g}^*}{|\mathbf{g} - \mathbf{g}^*|}, \quad (2.13)$$

consideramos que o vetor  $\mathbf{k}$  bissecta o ângulo entre as velocidades relativas assintóticas durante uma colisão, de tal forma, escrevemos

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{g} = -\mathbf{k} \cdot \mathbf{g}^*. \quad (2.14)$$

Desta maneira, podemos escrever

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_1^* - \mathbf{v}^* - (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}) &= \mathbf{g}^* - \mathbf{g} \\ &= \mathbf{k} [\mathbf{k} \cdot (\mathbf{g}^* - \mathbf{g})] \\ &= -2\mathbf{k} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{g}), \end{aligned} \quad (2.15)$$

com o auxílio da equação (2.5) podemos eliminar  $\mathbf{v}^*$  e  $\mathbf{v}$  na equação (2.15) e obtemos

$$\mathbf{v}_1^* = \mathbf{v}_1 - \mathbf{k} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{g}). \quad (2.16)$$

De maneira similar, por intermédio da equação (2.5) podemos eliminar os termos de  $\mathbf{v}_1^*$  e  $\mathbf{v}_1$  da equação (2.15) e escrevemos

$$\mathbf{v}^* = \mathbf{v} + \mathbf{k} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{g}), \quad (2.17)$$

as equações (2.16) e (2.17) são as velocidades assintóticas pós-colisionais em função das velocidades assintóticas pré-colisionais. Uma vez obtidas as equações (2.16) e (2.17), podemos escrever de maneira direta as velocidades assintóticas pré-colisionais em função das velocidades assintóticas pós-colisionais. As velocidades assintóticas podem uma consequência da força de repulsão sofrida pelo par de partículas. Aqui apresentamos alguns aspectos básicos da dinâmica de colisão binária, na próxima seção abordaremos um método de integração numérica para sistemas de colisões.

## 2.2 Dinâmica molecular de colisões binárias

Uma maneira de obter informações sobre sistemas colisionais é por intermédio de métodos de integração numérica. Portanto, há muito tempo esses sistemas têm sido simulados com dinâmica molecular e cada vez mais em maior quantidade de partículas e tempo de observação, devido ao avanço dos computadores. Um método pioneiro para a integração de tais sistemas é o método *event driven*, ou simplesmente, método *dirigido por eventos*, proposto por Alder e Wainwright em [10]. O método *event driven* consiste basicamente em dirigir a dinâmica de acordo com o tempo de colisão  $t_{i,j}$  entre duas partículas  $i$  e  $j$  que entrarão em processo de colisão.

### 2.2.1 Cálculo do tempo de colisão $t_{i,j}$

Quando consideramos um potencial do tipo *esfera dura* (i.e. função descontínua com a distância) [11], toda vez que a distância entre duas partículas for um ponto descontínuo no potencial, uma colisão ocorrerá, neste instante as velocidades das partículas mudarão subitamente mediante a uma força de repulsão. Desta forma, a cada evento colisional a variação da velocidade é descontínua. Representamos o potencial para esferas rígidas como

$$\Phi(\mathbf{r}_{ij}) = \begin{cases} 0 & \text{se } \sigma \leq \mathbf{r}_{i,j} \\ \infty & \text{se } \mathbf{r}_{i,j} < \sigma \end{cases}, \quad (2.18)$$

sendo  $\mathbf{r}_{i,j} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$  e  $\sigma$  o diâmetro de cada partícula.

Um dos objetivos principais de uma simulação de dinâmica colisional consiste em calcular o intervalo de tempo para que uma colisão ocorra, localizando as partículas que irão se chocar e prever quais serão os parâmetros de impacto, tudo isso realizado em ordem cronológica. A simulação de esferas rígidas exige um procedimento em que a dinâmica é dirigida *colisão a colisão* [11, 12, 13], portanto, para se encontrar uma próxima colisão, é necessário calcular o intervalo de tempo em que a diferença das posições das partículas  $i$  e  $j$  seja o valor de  $\sigma$ , como visto na figura 2.1.

Quando temos duas esferas  $i$  e  $j$ , com determinado diâmetro  $\sigma$ , sendo que suas posições no tempo  $t$  é dada por  $\mathbf{r}_i$  e  $\mathbf{r}_j$ , com suas velocidades representadas por  $\mathbf{v}_i$  e  $\mathbf{v}_j$ , seguindo em movimento livre, consideraremos que essas partículas colidirão em um tempo  $t + t_{i,j}$ . Desta

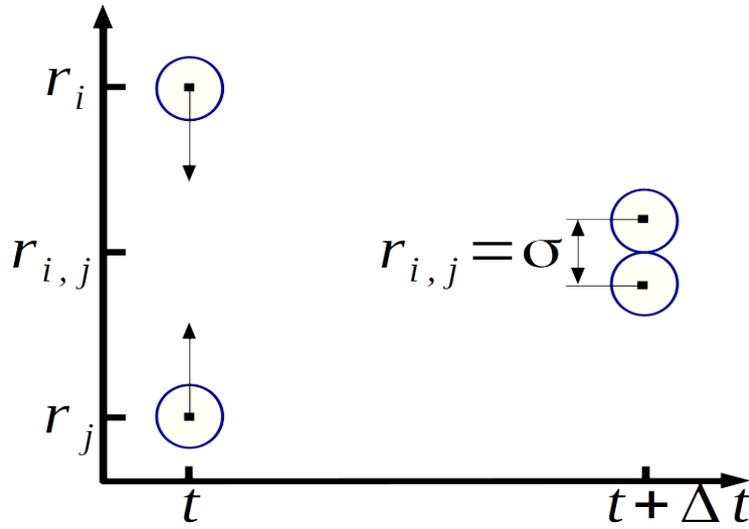


Figura 2.1: Representação da condição de colisão dado um passo  $\Delta t$ .

forma, escrevemos a seguinte equação

$$|\mathbf{r}_{i,j}(t + t_{ij})| = |\mathbf{r}_{i,j} + \mathbf{v}_{i,j}t_{ij}| = \sigma, \quad (2.19)$$

onde  $\mathbf{v}_{i,j} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$  é a velocidade relativa entre as partículas e  $t_{ij}$  o intervalo de tempo até o evento de uma colisão.

Para obtermos uma equação que expresse  $t_{i,j}$ , consideraremos o quadrado de (2.19)

$$\begin{aligned} (\mathbf{r}_{i,j} + \mathbf{v}_{i,j}t_{i,j})^2 &= \sigma^2 \\ \mathbf{r}_{i,j}^2 + 2\mathbf{r}_{i,j} \cdot \mathbf{v}_{i,j}t_{i,j} + \mathbf{v}_{i,j}^2 t_{i,j}^2 &= \sigma^2 \\ \mathbf{v}_{i,j}^2 t_{i,j}^2 + 2b_{i,j}t_{i,j} + \mathbf{r}_{i,j}^2 - \sigma^2 &= 0, \end{aligned} \quad (2.20)$$

usamos a definição  $b_{i,j} = \mathbf{r}_{i,j} \cdot \mathbf{v}_{i,j}$ . A equação (2.20) é quadrática em  $t_{i,j}$  e para obtermos o valor do tempo requerido, precisamos fazer as seguintes considerações

- se  $b_{i,j} > 0$  significa que todas as partículas estarão se afastando uma da outra, caso que não nos interessa.
- se  $b_{i,j} < 0$  significa que pode ocorrer colisão, no entanto, na equação de  $t_{i,j}$  podemos ter a seguinte situação para o discriminante  $b_{i,j}^2 - \mathbf{v}_{i,j}^2 (\mathbf{r}_{i,j}^2 - \sigma^2) < 0$ , o que resultaria em raízes complexas, situação não física.

Portanto, para qualquer outro caso obtemos equação que fornece duas raízes positivas, sendo

escrita como

$$t_{i,j} = \frac{-b_{i,j} \pm \left( b_{i,j}^2 - \mathbf{v}_{i,j}^2 \left( \mathbf{r}_{i,j}^2 - \sigma^2 \right) \right)^{1/2}}{\mathbf{v}_{i,j}^2} \quad (2.21)$$

Um dos modelos mais básicos em que podemos analisar a dinâmica colisional é considerando que todas partículas têm formatos esféricos, sendo lisas e inelásticas, seguindo uma trajetória livre até que uma colisão ocorra. Neste modelo simplificado não existe troca de momento angular entre colisões, ocorrendo apenas troca de momento linear [11]. Quando tratamos de colisões de esferas rígidas a perda de energia se dá instantaneamente e varia de acordo com o valor atribuído ao coeficiente de restituição  $\alpha$ , que assume valores entre 0 e 1. Para a situação em que  $\alpha = 0$  temos um sistema totalmente inelástico, por outro lado, quando  $\alpha = 1$  há um sistema totalmente elástico [8]. Nas simulações computacionais realizadas para este trabalho, consideramos a última situação.

Portanto, para considerar a mecânica de troca de velocidades entre partículas, assumiremos que todas possuem massas iguais e mudam de velocidade de acordo com a seguinte equação

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_i^* &= \mathbf{v}_i + \frac{1 + \alpha}{2} \delta \mathbf{v}_i \\ \mathbf{v}_j^* &= \mathbf{v}_j - \frac{1 + \alpha}{2} \delta \mathbf{v}_i, \end{aligned} \quad (2.22)$$

sendo  $\mathbf{v}_i^*$  e  $\mathbf{v}_j^*$  as velocidades das partículas imediatamente após as colisões. Além disso definimos  $\delta \mathbf{v}_i = -(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{ij}) \mathbf{k}$ , sendo o vetor unitário  $\mathbf{k}$  definido em (2.13).

Desta maneira, percebemos que para que haja decréscimo na energia do sistema, somente a mudança de velocidade relativa ao longo do eixo radial é considerada. Escrevemos a variação de energia como

$$\Delta E = -\frac{1}{4} (1 - \alpha^2) (\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})^2, \quad (2.23)$$

sendo  $\mathbf{e}_{i,j} = \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$ . Conhecidas todas as ferramentas necessárias para realizar uma dinâmica de colisão, explicaremos agora o método numérico *event driven*.

### 2.2.2 Método *event driven*

O método *event driven* consiste basicamente em dirigir a dinâmica de colisão de acordo com um dado tempo de colisão  $t_{i,j}$  obtido pela equação (2.21). Desta forma, quando executamos a simulação de um gás de esferas rígidas, obtemos o cálculo de  $t_{i,j}$  para todos os pares de partículas, sendo esta a parte mais dispendiosa na simulação de colisões. Após esta etapa, fazemos a triagem do menor tempo de colisão entre os pares, pois será neste tempo que as partículas  $i$  e  $j$  se colidirão. Em seguida todas as partículas serão movidas em linha reta em um passo de tempo dado pelo menor  $t_{i,j}$ , e por fim, aplicamos a dinâmica colisional ao par de partículas  $i$  e  $j$ , com esses procedimentos sendo repetidos de acordo com o número de observações desejadas.

Podemos sintetizar o método *event driven* nos seguintes passos

1. Inicialização do sistema, distribuição das posições e velocidades.
2. Cálculo do tempo de colisão  $t_{i,j}$  entre todos os pares de partículas.
3. Triagem do menor tempo de colisão  $t_{i,j}$ .
4. Mover todas as partículas com o passo do menor tempo  $t_{i,j}$ .
5. Implementar a dinâmica colisional para o par  $i$  e  $j$ .
6. Calcular propriedades físicas de interesse.
7. Retornar ao passo 2.

Para realizarmos a simulação do gás de esferas rígidas, consideramos o caso mais simplificado, onde consideramos o coeficiente de restituição  $\alpha = 1$ , com choques perfeitamente elásticos. Na simulação consideremos um sistema unidimensional. A condição de contorno empregada foi uma condição periódica. No que tange as propriedades do sistema, a energia obtida é sempre constante, com a conservação total do momento sendo verificada. Medidas físicas pertinentes ao sistema de colisão serão apresentadas nos resultados desta tese, capítulo 6.

# Capítulo 3

## Sistemas com interação de longo alcance

Neste capítulo explanaremos algumas características dos *sistemas de longo alcance* – *SLA*, pois uma classe de fenômenos físicos envolve tais sistemas, porém, se conhece bem mais sobre as propriedades estatísticas e dinâmicas dos *sistemas de curto alcance* – *SCA*. Os SLA possuem peculiaridades interessantes, motivando pesquisas nessa área [14]. Exemplos de SLA são encontrados nos sistemas gravitacionais e em modelos astrofísicos [15], há também a presença em física de plasmas [16], líquido e cristais confinados [17], como em sistemas coulombianos não blindados [18]. Ademais, há exemplos para sistemas hidrodinâmicos bidimensionais, sistemas elásticos bidimensionais e na física atômica e molecular [14], além de outros sistemas [14].

Nos estudos de mecânica estatística, um dos principais objetivos é a obtenção de informações sobre propriedades termodinâmicas de sistemas macroscópicos, a obtenção de tais informações é feito por intermédio do conhecimento das interações microscópicas. A conexão entre os níveis *microscópico* (*mecânica*) e *macroscópico* (*termodinâmica*) é feito pela introdução do conceito de *ensemble estatístico* [6]. No entanto, é conhecido que no limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ,  $V \rightarrow \infty$  e  $N/V = \text{constante}$ ) as previsões das médias macroscópicas são independentes do *ensemble estatístico* escolhido, o que é denominado de *equivalência de ensemble*.

Uma das principais características dos SLA é que eles podem apresentar a *não equivalência de ensembles* [14], entrando em discordância com as previsões *mecânica estatística tradicional*. Uma das razões para isso se dá pelo fato que os SLA por mais que possam ser resolvidos de maneira extensiva, são em sua natureza sistemas *não aditivos*, ou seja, a soma das energias dos

subsistemas macroscópicos não é igual a soma de todo o sistema. Além disso, o espaço dos parâmetros termodinâmicos acessíveis pode ser *não convexo* [14]. Quando se apresenta a *não equivalência de ensembles*, o sistema microcanônico contém toda informação sobre o equilíbrio do sistema canônico, já o inverso é errado. De todas características que os SLA apresentam, uma que chama bastante atenção é o surgimento do *calor específico negativo* [19] no ensemble microcanônico. Para o ensemble canônico o *calor específico* sempre será positivo independente da natureza da interação do sistema [14].

SLA são sistemas onde se apresenta *não localidade entre interações das partículas*, ou seja, a interação se faz em um campo de força. Para descrever tais sistemas, Lynden-Bell – LB propôs uma teoria explicando que o processo dinâmico de SLA é composto por um curto período denominado de *relaxação violenta – RV* seguido pelo surgimento dos *estados quase estacionários – EQE* [20]. O caminho para o equilíbrio termodinâmico em SLA é caracterizado por uma dinâmica extremamente lenta, além do mais, o processo se torna mais demorado de acordo com o crescimento do número  $N$  de partículas, desta maneira dizemos que SLA não são sistemas termodinâmicos. Tal característica dos SLA é devida a própria natureza do potencial e não se dá ao fato de ser um fenômeno coletivo. Ilustramos esse processo dinâmico na figura 3.1.

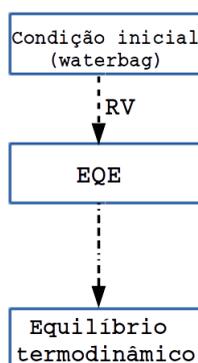


Figura 3.1: Representação dos estágios do processo dinâmico de SLA.

Uma melhor compreensão desse processo de relaxamento incomum é obtida por intermédio de uma teoria cinética apropriada, baseada na equação de Vlasov. Também nota-se que os EQE não são *estados termodinâmicos metaestáveis*, uma vez que não se situam nos extremos dos potenciais termodinâmicos em equilíbrio. Além disso, é importante ressaltar que toda a dinâmica dos EQE variará de acordo com as condições iniciais dadas ao sistema, ou seja, toda evolução dos SLA é fortemente dependente das condições iniciais escolhidas [14].

A natureza das peculiaridades que os SLA apresentam como *não aditividade*, *não extensividade*, *não equivalência de ensemble* e outras diferenças comparadas as teorias padrões estão diretamente associadas com o crescimento superlinear da energia com o tamanho do sistema [14], como visto na introdução deste trabalho. Apresentaremos agora dois modelos de SLA para melhor exemplificar a fenomenologia de tais sistemas.

### 3.1 Modelo de folhas

Devido a grande dificuldade de resolução dos SLA o entendimento de alguns aspectos se torna complicado, por exemplo, o entendimento do processo de relaxação de uma galáxia (equilíbrio térmico) que é da ordem do tempo de vida do universo [22]. Portanto, foi necessária a implementação de técnicas suplementares aos cálculos analíticos. Com a evolução dos computadores, muito se pode fazer para o entendimento de tais sistemas com a utilização de “*modelos de brinquedo*”, termo autóctone do inglês, “*toy models*”, que são sistemas simplificados, mas que carregam consigo informações relevantes, correspondentes as informações de sistemas mais complexos. Tais modelos possibilitam uma análise mais fácil dos SLA, nos possibilitando inferências estatísticas sobre o sistema. Um *toy model* bastante conhecido que aborda as características de um sistema de longo alcance é o modelo de *folhas*, que pode ser empregado tanto no caso de um potencial gravitacional ou Coulombiano [23].

Sendo estudado há bastante tempo, o modelo de *folhas autogravitantes* já contribuiu bastante para o conhecimento sobre os SLA. Por exemplo, é conhecido que o processo dinâmico dos SLA é composto por um período de RV seguido dos EQE [20], de acordo com a teoria de LB. Por tanto, no fim da década de sessenta, trabalhos pioneiros de folhas autogravitantes [24, 25, 26] estudaram as propriedades dos estados quasi-estacionários na tentativa de verificar a validação da teoria de LB. Tema que ainda hoje tem sido controverso, pois há trabalhos que atestam a validade da teoria de LB na análise dos EQE [27, 28, 29, 30], enquanto há outros trabalhos que alegam o contrário [31, 32] averiguando os limites de validade de tal teoria.

Dentro das riquezas dos SLA [14], outras propriedades estatísticas também são estudadas por intermédio do modelo de folhas autogravitantes. Um bom exemplo é o estudo sobre a relaxação para o equilíbrio térmico, que para tal modelo temos uma mecânica estatística analítica bem derivada [33]. Porém, como em todos SLA, tal processo de relaxação ocorre de maneira muito lenta, com sua escala de tempo divergindo com o número de partículas do sistema, portanto, muito se discute sobre uma escala de tempo precisa e suas dependências paramétricas [34, 35, 36, 37]. Outro ponto bastante discutido é a questão da dependência dos SLA às condições iniciais escolhidas, uma questão em aberto. Esses casos aqui citados são apenas alguns exemplos da abundância de informações que portam os SLA.

O modelo de folhas autogravitantes é descrito como um conjunto de  $N$  folhas (planos) infinitas de massa  $m_j$ . Cada folha se situa no eixo  $y - z$  com movimento orientado na direção do eixo  $x$ ,

como descrito na figura 3.2. Considerando que cada folha possui a mesma densidade superficial e durante o período da dinâmica as folhas podem atravessar umas as outras. O Hamiltoniano

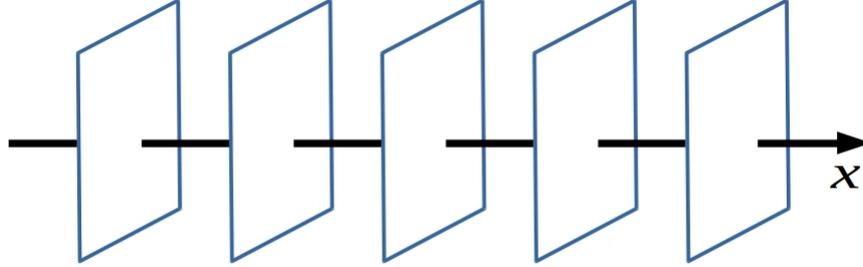


Figura 3.2: Representação do modelo de folhas gravitacionais

que descreve tal sistema é dado por

$$H(X, P) = \sum_{j=1}^N \frac{P_j^2}{2m_j} + 2\pi G \sum_{j < k}^N m_j m_k |X_j - X_k|. \quad (3.1)$$

Na equação acima, o primeiro termo se refere a energia cinética e o segundo a energia potencial. Sistemas de longo alcance normalmente são sistemas não-extensivos, como vemos na equação (3.1), não existe uma dependência entre o número de partículas com o termo da energia potencial. Portanto, para solucionar este problema é utilizada a seguinte transformação canônica

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

para validar a transformação canônica consideramos que todas as folhas possuem o mesmo valor de massa  $m_j$ . Desta maneira reescrevemos (3.1) e obtemos

$$H(x, p) = \frac{a^2}{m} \left\{ \sum_{j=1}^N \frac{p_j^2}{2} + \frac{1}{N} \sum_{j < k}^N |x_j - x_k| \right\}. \quad (3.2)$$

Realizada tal transformação, em (3.2) podemos negligenciar o fator geral  $a^2/m$  mudando a escala de tempo e, portanto, consideramos o seguinte sistema Hamiltoniano simples

$$H(x, p) = \sum_{j=1}^N \frac{p_j^2}{2} + \frac{1}{N} \sum_{j < k}^N |x_j - x_k|. \quad (3.3)$$

Na equação (3.3) o fator  $1/N$  no termo potencial garante a extensividade do sistema. À vista disso, quando consideramos uma determinada energia  $U$ , o valor da energia por partícula é finito quando adotado o limite  $N \rightarrow \infty$ . O artifício para garantir extensividade foi a prescrição de Kac [2]. Podemos escrever a força percebida por uma folha gravitacional

$$F_j = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \frac{x_j - x_k}{|x_j - x_k|} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \text{sgn}(x_j - x_k). \quad (3.4)$$

De acordo com (3.4) vemos que a força percebida por uma partícula é a contribuição da soma de todas as outras partículas do plano. Agora estudaremos o modelo de folhas analisado por um potencial Coulombiano.

### 3.1.1 Modelo de folhas carregadas

Um modelo de plasma unidimensional bastante interessante foi estudado por Kumar e Miller [38], onde consideram um conjunto de  $N$  folhas carregadas com densidade de carga  $q$ , massa superficial  $m$  que se cruzam ao longo da dinâmica. O modelo considera que cada folha está sob influência de um campo elétrico constante e dependente da posição de todas as outras folhas, sendo o campo para uma determinada partícula  $i$  a soma de todas as partículas à esquerda e à direita (a partir de agora usaremos o termo partículas para designar as folhas). Outro trabalho relacionado a plasmas utilizando folhas carregadas foi feito por Rouet e Feix [39], onde os autores propõem um método numérico eficiente para encontrar tempo de espera para o cruzamento entre cada partícula (um método dirigido por evento otimizado) e também implementado ao caso gravitacional [23, 40].

Desta maneira, tentaremos reproduzir um sistema de folhas similar ao encontrado em [38, 39]. Para tanto, consideramos um modelo unidimensional de comprimento  $2L$ . A interação de uma partícula com as outras se dá por intermédio de um potencial Coulombiano, sendo o acoplamento das partículas de longo alcance. Representamos graficamente o campo Coulombiano  $E(x)$  de acordo com a figura 3.3.

Durante o período da dinâmica, consideramos que cada partícula do sistema pode encontrar uma partícula vizinha, no qual um cruzamento será realizado. Podemos também considerar que cada cruzamento possa ser visto como uma colisão perfeitamente elástica, desta maneira, o ordenamento das partículas será o mesmo do início da dinâmica, mantendo o valor do campo

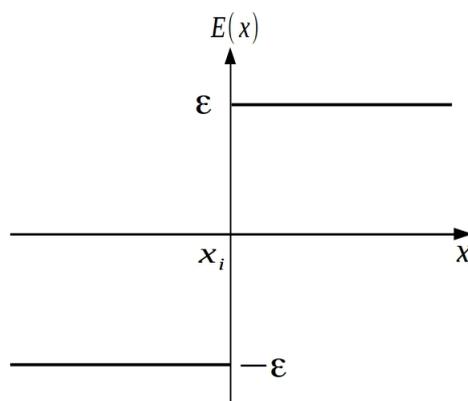


Figura 3.3: Representação do campo elétrico Coulombiano.

$E(x_i)$  sempre constante. O movimento das partículas dentro do sistema se dá no eixo  $x$ , como visto na figura (3.2), porém, para evitar que haja divergência no campo devido aos efeitos de repulsão Coulombiana no infinito, consideraremos que haverá periodicidade no sistema, fazendo com que tenhamos um sistema fechado. A escolha de um sistema periódico implica que toda vez que uma determinada partícula sai de um lado ela retorna pelo lado oposto, como representamos na figura 3.4.

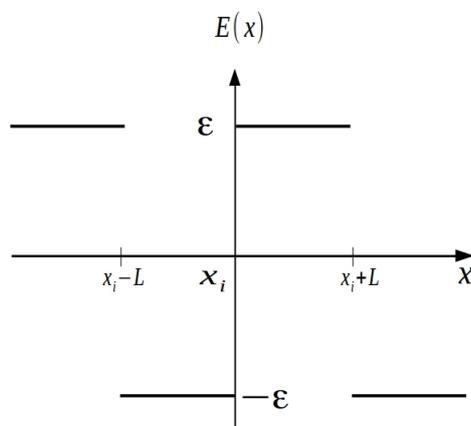


Figura 3.4: Representação periódica do campo elétrico para o sistema periódico de tamanho  $2L$  com uma carga  $q_i = 1$

### O campo elétrico

Com a consideração de um sistema periódico, podemos considerar a dinâmica do sistema sobre um círculo de raio  $L/\pi$ , representado pela figura 3.5 [41]. Como conhecemos que a equação de Poisson é linear, o campo elétrico total devido as  $N$  partículas do sistema será a soma da

contribuição de cada uma das  $N$  partículas. Consequentemente, no círculo, o campo percebido por uma partícula de posição  $x_i$  nada mais é do que a contribuição do número de partículas que estão à esquerda  $x_j - L < x_i < x_j$ , juntamente a contribuição do número de partículas à direita  $x_j < x_i < x_j + L$ . O campo elétrico total  $E(x_i)$  de uma partícula  $i$  será escrito como

$$E(x_i) = \epsilon \sum_{i \neq j}^N q_j \text{sgn}_L(x_i - x_j), \quad (3.5)$$

onde  $\text{sgn}_L$  garante a condição de periodicidade e  $\epsilon$  é constante de acoplamento que determinará caso atrativo ( $\epsilon < 0$ ) ou repulsivo ( $\epsilon > 0$ ).

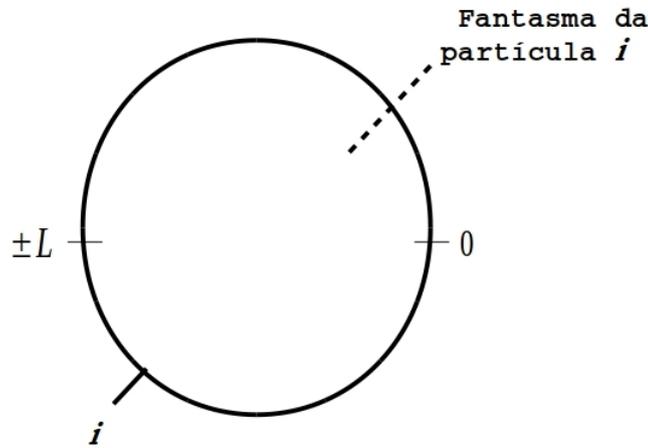


Figura 3.5: Representação esquemática do círculo onde ocorre a dinâmica devido a escolha de um sistema periódico. Na figura temos a representação da partícula  $i$  e de seu fantasma correspondente assinalado pela linha pontilhada.

Como podemos observar, na figura 3.5 introduzimos uma partícula que é diametralmente oposta a partícula  $i$ , representamos tal partícula por uma linha pontilhada e denominamos “partícula fantasma de  $i$ ” [41]. A introdução das partículas fantasmas se justifica por ser um artifício que ajuda a distinguir todas partículas que estarão a direita ou a esquerda de uma dada partícula  $i$  na hora de realizar a contagem para obtenção do campo  $E(x_i)$ . Desta forma, uma partícula fantasma tem um papel muito importante na dinâmica do sistema, pois quando uma partícula  $i$  se cruza com uma partícula fantasma o valor do campo percebido por esta partícula  $i$  é modificado. Tal efeito está ligado diretamente a condição de periodicidade do sistema, sendo percebido da mesma maneira pela partícula fantasma de  $i$  que obtém a mesma massa, mas carga oposta a partícula real. Sendo assim, podemos associar a cada partícula real  $i$  uma partícula fantasma com

mesma velocidade, mas com carga e posição oposta. Uma representação pictórica da contagem de partículas é apresentada no apêndice A.1.1.

Ademais, o sistema total é uma composição de  $2N$  partículas reais e fantasma sendo que cada partícula fantasma é portadora de carga e campo diferente de sua partícula oposta. No quesito dinâmica, a aceleração de uma partícula fantasma é a mesma da partícula real que lhe é associada. Quando introduzimos  $N$  partículas fantasmas podemos analisar que uma metade do círculo é o reflexo exato da outra metade, sendo assim, podemos considerar que cada partícula real e fantasma serão indistinguíveis para cada metade do sistema. À vista disso, podemos interpretar o sistema como um plasma de  $N$  partículas de densidade  $N/L$  confinado em uma caixa de comprimento  $L$ . Notemos que o campo elétrico total pode ser representado como  $E(x_i) = \epsilon \{Q_e(x_i) - Q_d(x_i)\}$ . Podemos, portanto, escrever a força percebida por uma partícula  $i$  como

$$F_i = -\epsilon q \{Q_e(x_i) - Q_d(x_i)\}, \quad (3.6)$$

onde  $Q_e(x_i)$  e  $Q_d(x_i)$  são as cargas totais de partículas a esquerda e a direita de uma determinada partícula  $i$ , ou seja, de acordo com a equação (3.6), a força percebida por partícula sempre será constante, fato que será importante na construção da dinâmica do sistema, como veremos a seguir.

### 3.1.2 Dinâmica do modelo de folhas carregadas e integração numérica

Como vemos na equação (3.6) a força de cada partícula durante a dinâmica é constante, exceto quando as partículas se cruzam, fato que faz a integração deste *toy model* exigir apenas a solução de uma equação quadrática para determinar o próximo tempo de cruzamento entre as partículas. Outra facilidade do problema é a interpretação dos cruzamentos entre partículas como colisões, pois devido ao cruzamento sem descontinuidade na velocidade, interpretamos tal fato como uma colisão perfeitamente elástica, nas quais partículas trocam apenas seus módulos de velocidades. Portanto, na integração deste sistema o erro é limitado apenas pelo processo de arredondamento numérico executado pela máquina.

Para analisar a dinâmica do modelo proposto, escrevemos o Hamiltoniano do sistema

$$H(x_i, p_i) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} - \frac{\epsilon}{2} \sum_{j=1}^N \sum_{i \neq j} q_i q_j |x_i - x_j|, \quad (3.7)$$

na equação (3.7) a primeira parte é referente a energia cinética do sistema e a segunda parcela referente a energia potencial, com  $\epsilon$  sendo a constante de acoplamento (designa os casos atrativos  $\epsilon=1$  e repulsivos  $\epsilon = -1$ ) e  $q$  a carga de cada partícula. Na parcela referente a energia potencial, devemos considerar que o módulo da diferença de posição como  $|x_i - x_j|_L = \min_{n \in \mathbb{Z}} |x_i - x_j - 2nL|$ , o que nos garante uma condição periódica circular.

A partir da derivação das equações de Hamilton<sup>1</sup> estamos habilitados a analisar a dinâmica do sistema, desta maneira escrevemos a força percebida por uma partícula  $i$  da seguinte maneira

$$m_i \ddot{x}_i = \epsilon q_i \sum_{j=1}^N q_j \text{sgn}(x_i - x_j), \quad (3.8)$$

como podemos observar da equação (3.8), o termo correspondente a aceleração de cada partícula será

$$A_i(x) = \frac{q_i}{m_i} E(x_i). \quad (3.9)$$

Para determinar a velocidade de uma dada partícula realizamos a integração direta para os elementos  $dv$  e  $dt$ , obtendo

$$v_i(t) = v_i^0 + A_i t, \quad (3.10)$$

sendo  $v_i^0$  a velocidade inicial de cada partícula.

### Cálculo do tempo $t_{i,j}$

Como o objetivo é o cálculo dos tempos de espera aos eventos colisionais, é necessária a integração da equação (3.10) à obtenção de uma equação do espaço em função do tempo. Quando consideremos que a cada encontro entre pares não haverá cruzamentos entre partículas, mas apenas colisão entre os pares  $i$  e  $j$ , utilizamos a seguinte condição  $x_i - x_j = 0$ , o que nos levará

---

<sup>1</sup>Nesta parte trabalho utilizamos as equações de Hamilton como  $\dot{x}_i = \frac{\partial H(x_i, v_i)}{\partial v_i}$  e  $\dot{v}_i = -\frac{\partial H(x_i, v_i)}{\partial x_i}$ .

escrever<sup>2</sup>

$$x_{ij}(t_{ij}) = x_{ij}^0 + v_{ij}^0 t_{ij} + \frac{1}{2} A_{ij} t_{ij}^2 = 0, \quad (3.11)$$

sendo os termos  $x_{ij}^0 = x_i^0 - x_j^0$ ,  $v_{ij}^0 = v_i^0 - v_j^0$  e  $A_{ij} = A_i - A_j$ . De acordo com (3.11) o tempo de espera para colisão entre os pares de partículas é dado por uma equação quadrática em  $t_{ij}$ , que terá como solução

$$t_{ij} = \frac{-v_{ij}^0 \pm \sqrt{(v_{ij}^0)^2 - 2A_{ij}x_{ij}^0}}{A_{ij}}. \quad (3.12)$$

Um ponto interessante é que a equação (3.12) se faz válida somente quando  $A_{ij} \neq 0$ , para sistema onde cada partícula  $i$  e  $j$  tem aceleração constante diferente. Quando desejamos analisar um sistema onde todas partículas têm a mesma aceleração constante  $A_i$ , chegamos a uma equação diferente para o tempo de espera  $t_{ij}$ , escrito como

$$t_{ij} = -\frac{x_{ij}^0}{v_{ij}^0}, \quad (3.13)$$

porém, apesar de escrevermos a equação (3.13), que é uma equação do primeiro grau, a integração das equações de movimento será da mesma forma que para os sistemas com acelerações diferentes às partículas.

### Implementação numérica e resultados

Um primeiro gráfico que apresentamos é análise da livre trajetória de cada partícula, simulamos um sistema de comprimento  $L$ , onde integramos analiticamente a equação (3.11) tanto para o caso atrativo como para o caso repulsivo, como apresentado na figura 3.6. Além disso, mostramos a dinâmica das partículas fantasmas sendo exatamente a mesma dinâmica de suas partículas reais correspondentes, mas em lado oposto. Ademais, observamos que durante o período de evolução temporal as partículas se cruzam algumas vezes, portanto, baseado nesses cruzamentos calcularemos o tempo  $t_{i,j}$  entre os pares, para então utilizar a dinâmica de colisão na substituição dos cruzamentos entre partículas.

---

<sup>2</sup>A equação espacial para uma única partícula é escrita como  $x_i(t) = x_i^0 + v_i^0 t + \frac{A_i t^2}{2}$ , sendo  $x_i^0$  a posição de uma dada partícula  $i$  no instante inicial da dinâmica.

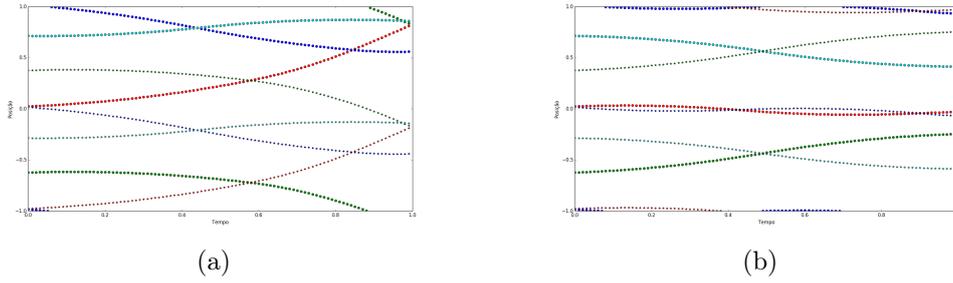


Figura 3.6: Representação da posição versus tempo do modelo de folhas com cruzamento. (a) dinâmica atrativa  $\epsilon = 1$ . (b) dinâmica repulsiva  $\epsilon = -1$ . Tempo total  $t = 1$ , passo numérico  $h = 0.01$ , carga  $q = 1$  e massa  $m = 1$ . Os círculos representam as partículas reais e em estrelas temos as partículas fantasmas. Sistema composto por 4 partículas reais e seus respectivos fantasmas.

Como a resolução numérica do modelo de folhas carregadas é interpretada como um sistema de colisões, um método usual é o conhecido *método dirigido por eventos*, já mencionado no capítulo anterior. Portanto, uma vez que calculamos o tempo  $t_{i,j}$  entre todos os pares de partículas, realizamos a triagem do menor tempo de colisão entre as partículas, evoluindo a posição das partículas nesse tempo até que o par  $i$  e  $j$  se colida. Após, fazemos as medidas físicas pertinentes e recomeçamos o cálculo do tempo  $t_{i,j}$  entre os pares. Nesta parte do trabalho otimizamos o cálculo do tempo de colisão entre os pares, de acordo com o método proposto em [39] e apresentamos o método no apêndice A.1.

Por adotarmos um sistema periódico, podemos considerar a condição de fronteira de duas maneiras possíveis, a cada vez que uma partícula sai ou entra em uma extremidade o tempo calculado para partícula sair pela extremidade poderá ser considerado como um evento ou não. Desta maneira, na implementação de nossas simulações numéricas, a cada vez que uma partícula sai por um dos extremos consideraremos um evento, pois além de calcular os tempos de colisão entre partículas, também calculamos o tempo em que uma partícula poderá sair por um dos extremos, caso o referido tempo seja menor que qualquer outro tempo de colisão, ele será o tempo escolhido na triagem de todos os tempos e desta maneira, evoluiremos todas as partículas de acordo com esse tempo e assim não haverá uma colisão, apenas uma partícula que sairá por um extremo do sistema, e reaparecerá no extremo oposto.

Apresentamos na figura 3.7 a evolução da posição pelo tempo ao sistema de folhas descrito pela equação (3.7), tanto para o caso atrativo como ao caso repulsivo. Na figura 3.7a temos a dinâmica para o caso atrativo ( $\epsilon = 1$ ), onde observamos claramente o efeito de colisões entre

partículas substituindo os cruzamentos, pois é observado que a curva do livre caminho médio em vez de ter uma forma parabólica devido ao termo quadrático em (3.11) tem seu sentido alterado a cada efeito colisional. Outro fato que devemos observar é que se consideramos somente uma metade do sistema, temos que as partículas reais e fantasmas serão indistinguíveis durante o período dinâmico respeitando a condição de periodicidade imposta ao sistema. De outro lado se consideramos somente as partículas reais, o sistema se torna incompleto, com efeito de colisão entre partículas se fazendo a distância. Já na figura 3.7b apresentamos o caso repulsivo, onde observamos uma dinâmica de colisão também evidente entre os pares, porém é visto que devido a natureza repulsiva ( $\epsilon = -1$ ) do potencial, uma partícula se encontra apenas com um único vizinho, diferentemente do caso atrativo, onde as partículas colidem com os vizinhos da esquerda e direita.

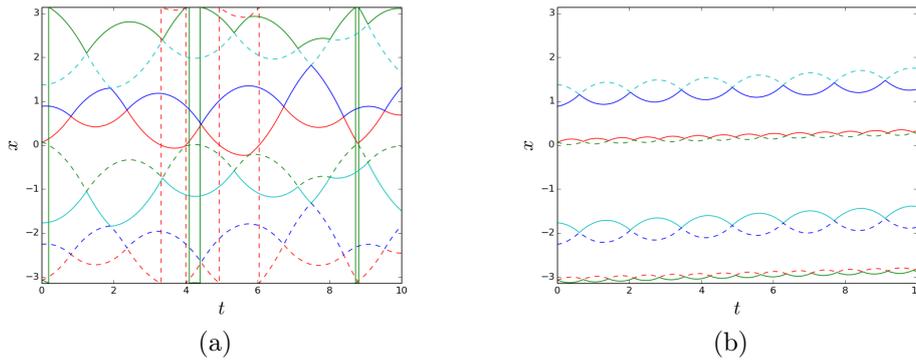


Figura 3.7: Evolução temporal da posição ao modelo de folhas carregadas com colisões. (a) dinâmica atrativa. (b) dinâmica repulsiva. Simulação realizada com  $N = 4$  partículas reais e seus respectivos fantasmas, tempo total  $t = 10$  e passo numérico  $h = 0.01$ . As linhas contínuas representam as partículas reais e as pontilhadas os fantasmas correspondentes.

Uma análise interessante ao modelo de folhas é a visualização do *espaço cinético* –  $EC(x, v)$ . Quando analisamos o EC, podemos ter uma melhor compreensão visual do processo dinâmico de um sistema de longo alcance. Apresentamos na figura 3.8 quatro estágios da evolução do EC, na primeira figura 3.8a temos a distribuição inicial das partículas<sup>3</sup> para o instante  $t = 0$ . De acordo com a teoria de LB, a dinâmica dos SLA é composta pelo período de RV seguida dos EQE. Para visualizar o primeiro estágio do processo dinâmico apresentamos as figuras 3.8b, 3.8c e 3.8d, que estão no estágio da RV para os instantes  $t = 5$ ,  $t = 10$  e  $t = 15$ . Observamos que

<sup>3</sup>A distribuição utilizada na simulação do modelos de folhas carregas é a conhecida waterbag, que será melhor discutida na proxima seção deste capítulo.

as partículas têm mudanças abruptas nos valores da velocidade e posição, como observado nas figuras. O último estágio da dinâmica são os EQE, que são os estados caracterizados por longa duração, dependente das condições iniciais escolhidas e por não apresentarem uma distribuição Maxwell-Boltzman para velocidade, sendo o processo dinâmico de maior interesse quando se estuda os SLA, figura 3.8e.

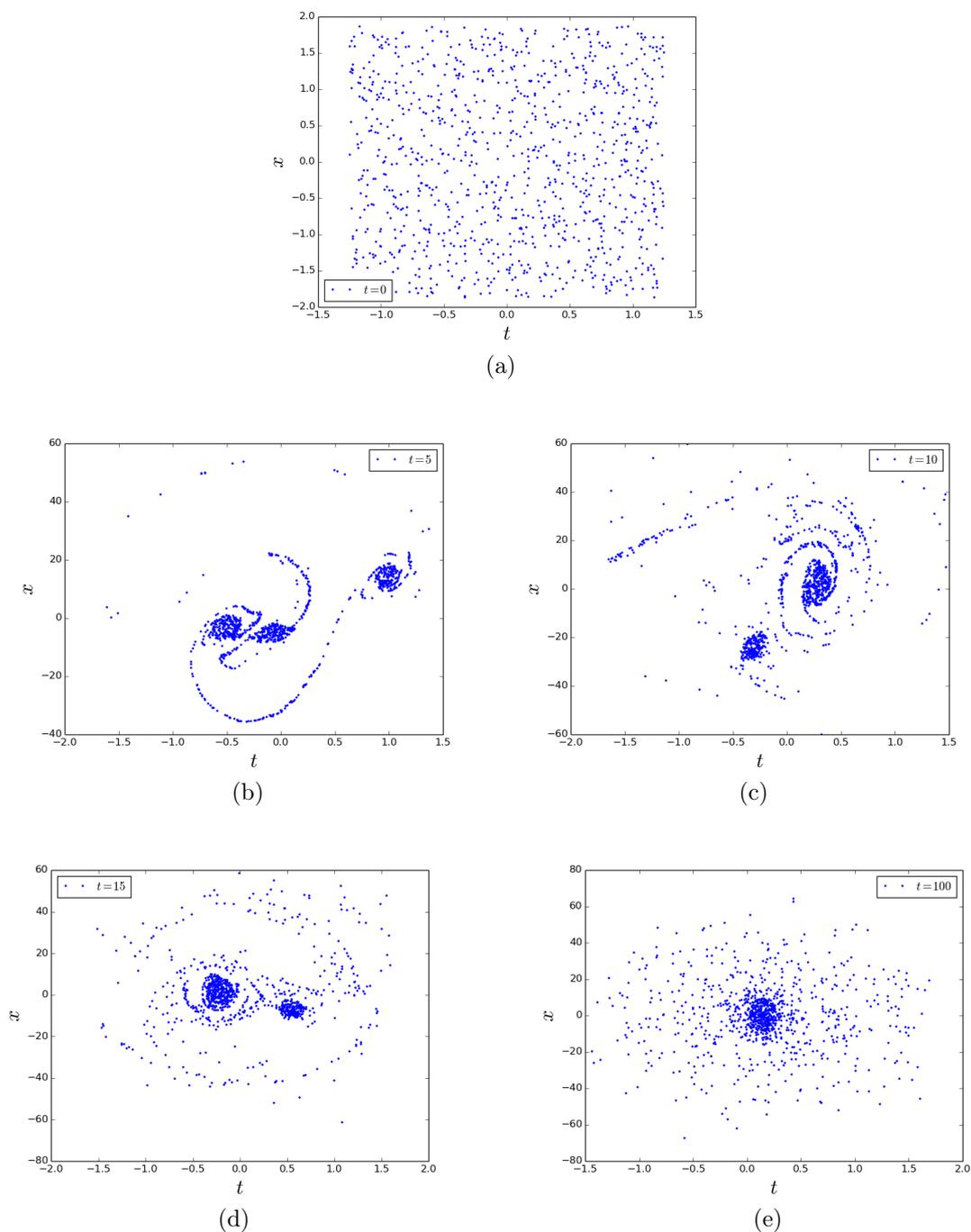


Figura 3.8: Representação do EC para o modelo de folhas. Em (a) sistema no instante  $t = 0$ . Em (b), (c) e (d) o sistema se encontra no processo de RV para os instantes  $t = 5$ ,  $t = 10$  e  $t = 15$ . Em (e) o sistema se encontra nos EQE para o instante  $t = 100$ . Simulação realizada com  $N = 1000$ .

## 3.2 Modelo cosHMF

Em 1995, M. Antoni e S. Ruffo publicam um artigo seminal descrevendo um sistema físico com dinâmica limitada a um círculo de raio unitário, onde todas partículas interagem no longo alcance [43]. O sistema ficou conhecido como *Hamiltoniano de Campo Médio*, ou simplesmente, *Hamiltonian Mean Field – HMF*, sendo um toy model bastante útil para o entendimento das propriedades físicas de SLA. O modelo do HMF é um caso simplificado de outro modelo de longo alcance, o modelo *Ring model – RM (Modelo Autogravitante do Anel)*[44, 45].

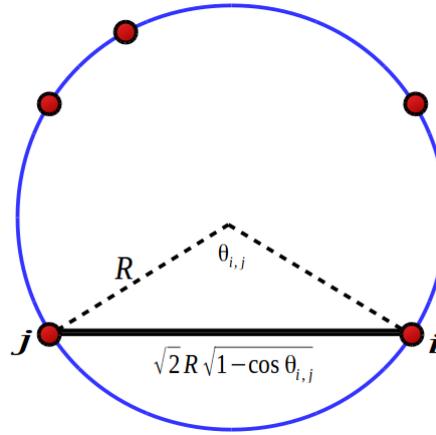


Figura 3.9: Representação do RM com interação de  $N$  partículas sobre o anel, com  $\theta_{i,j}$  sendo a diferença relativa entre as partículas  $i$  e  $j$  e  $R$  o raio unitário.

A ilustração desse sistema é vista na figura 3.9. Para o sistema do RM, escreveremos o termo potencial de interação entre partículas como

$$V(r_{i,j}) = \frac{-Gm^2}{r_{i,j}}, \quad (3.14)$$

com  $G$  sendo a constante gravitacional e  $m$  o termo de massa. De acordo com a figura 3.9 temos que  $r_{i,j} = \sqrt{2}R\sqrt{1 - \cos\theta_{i,j}}$ , sendo  $\theta_{i,j} = \theta_i - \theta_j$  a posição relativa das partículas  $i$  e  $j$  e  $R$  o raio do círculo.

Para que possamos evitar problemas de divergência no termo potencial da equação (3.14) quando  $\theta_{i,j} \rightarrow 0$ , é necessária a introdução de um parâmetro  $\epsilon$ , que servirá como um amortecimento ao termo potencial, sendo assim, reescrevemos (3.14) da seguinte maneira

$$V(r_{i,j}) = \frac{-Gm^2}{\sqrt{2}R\sqrt{1 - \cos\theta_{i,j} + \epsilon}}.$$

Além disso, definimos o momento para uma dada partícula  $i$  como

$$P_i = mR^2 \frac{d\theta_i}{dt}, \quad (3.15)$$

com essa definição, escrevemos o Hamiltoniano ao RM

$$H(P, \theta) = \frac{1}{2mR^2} \sum_{i=1}^N P_i^2 - \sum_{1=i < j}^N \frac{Gm^2}{\sqrt{2R} \sqrt{1 - \cos \theta_{i,j} + \epsilon}}. \quad (3.16)$$

Na equação (3.16) o primeiro termo se refere a parte cinética e o segundo termo a parte potencial. No entanto, quando adotamos o limite  $\epsilon \rightarrow \infty$ , o Hamiltoniano (3.16) descreverá o modelo HMF, como veremos em breve neste capítulo. O modelo do RM apresenta algumas características peculiares, por exemplo, o surgimento de calor específico negativo na curva calórica, o que torna este sistema muito interessante na análise termodinâmica e estatística [44, 45].

Por ser uma simplificação do RM, o sistema HMF se torna uma excelente ferramenta, por ser mais simples matematicamente e nas resoluções numéricas computacionais. Desta maneira, o estudo deste sistema já contribuiu bastante para o desenvolvimento de uma termodinâmica e estatística de SLA [14, 42, 43]. Portanto, alguns estudos se atentam a questão da lenta relaxação para o equilíbrio térmico, como visto nas referências [46, 47, 48, 49]. Porém antes de se chegar a um equilíbrio termodinâmico o sistema permanece nos EQE, que também são estudados em detalhes nos trabalhos [50, 51], sendo estes estados sensíveis as escolhas das condições iniciais e proporcionais ao número  $N$  de partículas do sistema [50].

Outra análise feita ao sistema HMF é fundamentada por intermédio da teoria cinética, mais precisamente a equação de Vlasov, que possibilita uma interessante análise dos EQE e o tempo de relaxação para o equilíbrio termodinâmico [52, 53, 54, 55]. Uma grande contribuição ao modelo HMF por intermédio da equação de Vlasov foi a descoberta de uma escala de tempo não trivial para a relaxação de Maxwell-Boltzmann [52], sendo dependente do valor de  $N$  e escrita como  $\tau(N) \sim N^{1.7}$ .

Ponto interessante é a questão da ergodicidade, devido ser um conceito fundamental da mecânica estatística [56]. Desta maneira, SLA são interessantes porque esse conceito não é verificado [57, 58, 59], sendo uma característica bastante intrigante desses sistemas. No caso específico do HMF a não-ergodicidade pode ser vista em [60, 61, 62, 63, 64]. Uma conclusão considerável sobre a quebra da ergodicidade é mostrada como sendo uma consequência da autocorrelação

entre a velocidade das partículas [61]. Como consequência da não-ergodicidade, sistemas com interações de longo alcance também apresentam outra questão muito curiosa, um processo de difusão anômala, que para o caso do HMF pode ser visto nos trabalhos [65, 66, 67, 68, 69].

Devido à possibilidade de uma resolução analítica para os ensembles microcanônico e canônico [43, 70], alguns aspectos termodinâmicos foram investigados analiticamente e numericamente, por exemplo, o processo de produção de entropia [71, 72, 73, 74]. No trabalho [72] os autores propõem uma explicação aos EQE pela análise do princípio da máxima entropia. Ademais, também foram investigados os processos de transição de fases, com resultados contributivos ao entendimento termodinâmico do sistema HMF [75, 76]. Passaremos agora para descrição do modelo.

### 3.2.1 Descrição do modelo cosHMF

Quando desejamos considerar um sistema de campo médio, o Hamiltoniano para descrever a interação de longo alcance pode ser representado como

$$H(p_i, \theta_i) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N V(\theta_i - \theta_j),$$

com a primeira parcela da equação representando a energia cinética e o segundo termo a energia potencial em uma descrição de campo médio. A partir desta descrição de campo médio construiremos o Hamiltoniano ao sistema *cosHMF* (cossine Hamiltonian Mean Field).<sup>4</sup>

O modelo do cosHMF é caracterizado como um conjunto de  $N$  partículas idênticas interagindo em um círculo unitário [43]. A dinâmica que cada partícula  $i$  estará submetida é regida pela evolução temporal da variável angular  $\theta_i$  e do momento conjugado  $p_i$ . Para obter as equações dinâmicas do modelo, escrevemos o hamiltoniano que se segue

$$H_{\text{cosHMF}} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{\epsilon}{2N} \sum_{i,j=1}^N [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)]. \quad (3.17)$$

Na equação (3.17) a primeira parte corresponde a *energia cinética*, já o próximo termo é correspondente a *energia potencial do sistema*, que corresponde ao termo de campo médio. Ademais, a constante  $\epsilon$  definirá as características do potencial. Para o caso em que  $\epsilon > 0$  trataremos de

---

<sup>4</sup>A partir deste momento vamos nos referir ao sistema HMF como cosHMF, devido ao simples fato de existirem vários sistemas com características de campo médio, portanto, para designar a especificidade deste sistema que tem no potencial o termo  $1 - \cos(\theta_i - \theta_j)$  e evitar reduzir todos sistemas de campo médio a um único sistema, nós o chamaremos de modelo cosHMF.

um sistema atrativo, denominado de *caso ferromagnético*. Quando considerado  $\epsilon < 0$ , estamos tratando do caso repulsivo, alcunhado de *caso antiferromagnético*.

### Equações de movimento

No modelo cosHMF todas as partículas interagem por intermédio de um campo de força, que a cada instante pode ser considerado como a soma dos campos individuais de todas as partículas [43]. Para o modelo cosHMF equação (3.17), o potencial de interação é reescalado pelos números de partículas, o que torna o potencial termodinamicamente estável, garantindo a extensividade da energia [2, 14, 42].

Escrevemos as equações de movimento como

$$\begin{aligned}\dot{\theta} &= p_i \\ \dot{p}_i &= -\frac{\epsilon}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\theta_i - \theta_j).\end{aligned}\quad (3.18)$$

A equação 3.18 corresponde a um sistema de  $N$  pêndulos acoplados. Além disso, para o sistema é introduzida a seguinte quantidade

$$\mathbf{m}_i = (\cos \theta_i, \sin \theta_j) \quad (3.19)$$

sendo (3.19) a definição do vetor magnetização associado a cada partícula. Desta maneira, escrevemos o vetor magnetização total

$$\mathbf{M} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e^{i\theta_i} \equiv M e^{i\varphi} \equiv (M_x, M_y), \quad (3.20)$$

representamos  $\varphi$  como o ângulo do vetor magnetização. Com o auxílio do vetor magnetização, podemos reescrever a força dada pela equação (3.17), como

$$\dot{p}_i = -\epsilon M \sin(\theta_i - \varphi). \quad (3.21)$$

A partir da equação (3.21) constatamos que a interação será auto-consistente para cada partícula devido à presença da quantidade de campo médio  $\mathbf{M}$ , que tem dependência temporal implícita devido à dependência imediata com as posições de todas as partículas. O vetor magnetização sempre apontará para região de maiores aglomeradas de partículas.

Escrevemos a *energia média por partícula* da seguinte maneira

$$U = \frac{H}{N} = \frac{\langle p^2 \rangle}{2} + \frac{\epsilon}{2} (1 - M^2), \quad (3.22)$$

sendo que o termo  $\langle p^2 \rangle$  representa a média do quadrado do momento sobre todas as partículas. Da equação (3.22) usamos o módulo da quantidade  $\mathbf{M}$  de campo médio como um parâmetro de ordem para caracterizar as fases do sistema. Quando consideremos o caso repulsivo ( $\epsilon = -1$ ), corresponde a situação física onde todas estarão uniformemente distribuídas no círculo, caso que representa magnetização nula; no caso atrativo ( $\epsilon = 1$ ), o estado fundamental corresponde a situação onde todas partículas estão na mesma posição, ocasionando uma magnetização alta.

### Termodinâmica e estatística

Quando se refere as propriedades termodinâmicas e estatísticas, o sistema cosHMF tem resultados analíticos bem fundamentados, encontra-se na literatura a solução ao ensemble microcanônico, como ao canônico [43]. Também há trabalhos onde se obtém a forma da entropia de Gibbs a partir de uma densidade de probabilidade  $f(p, \theta, t)$  definida no espaço  $(p, \theta)$  [77]. Calcularemos a solução para o ensemble canônico, porém, como será de interesse posterior, incluiremos ao termo cinético do Hamiltoniano (3.17) a contribuição das massas de cada partícula  $i$ . Desta maneira, reescrevemos (3.17) como

$$H_{\text{cosHMF}} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{\epsilon}{2N} \sum_{i,j=i}^N [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)].$$

Para encontrar solução analítica para o equilíbrio, utilizaremos a função de partição canônica, definida como

$$Z(\beta, N) = \int \exp(-\beta H) d^N p_i d^N \theta_i. \quad (3.23)$$

Um caminho para a resolução da equação (3.23) é separar a equação em duas partes, uma correspondente ao termo cinético e outra parte correspondente ao termo potencial,  $Z = Z_K \cdot Z_V$ . A solução referente ao termo cinético é obtida diretamente, escrevemos

$$Z_K = \left( \frac{2\pi m_1}{\beta} \right)^{\frac{N_1}{2}} \left( \frac{2\pi m_2}{\beta} \right)^{\frac{N_2}{2}},$$

como estamos considerando um sistema com massas diferentes no termo cinético para o sistema

cosHMF, definimos os termos  $m_1$  e  $m_2$  que representam as duas espécies de partículas, mais massivas e menos massivas. Desta forma, o número total de partículas será a contribuição da soma das partículas com massas diferentes, como representado  $N = N_1 + N_2$ . O próximo passo para o cálculo é a resolução da parte configuracional do Hamiltoniano, dada por

$$Z_V = \exp\left(-\frac{\beta\epsilon N}{2}\right) J. \quad (3.24)$$

Como podemos ver, a parte configuracional do modelo (3.24) é representada por um termo exponencial que sai da integração devido não ter dependência espacial, além de apresentar o termo que definimos como  $J$ , escrevemos

$$J = \int_{-\pi}^{\pi} \cdots \int_{-\pi}^{\pi} \exp\left(\frac{\beta\epsilon}{2N} \sum_{i,j=1}^N \cos(\theta_i - \theta_j)\right) \prod_{i=1}^N d\theta_i,$$

reescrevemos a equação acima utilizando a definição feita em (3.19), resultando em

$$J = \int_{-\pi}^{\pi} \cdots \int_{-\pi}^{\pi} \exp\left[\frac{\beta\epsilon}{2N} \left(\sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i\right)^2\right] \prod_{i=1}^N d\theta_i. \quad (3.25)$$

Para a integração da equação (3.25) utilizaremos a transformação de Hubbard-Stratonovich

$$\exp\left(\frac{\mu}{2} \mathbf{x}^2\right) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\mathbf{y}^2 + \sqrt{2\mu} \mathbf{x} \cdot \mathbf{y}\right) d\mathbf{y},$$

onde  $\mu = \frac{\beta\epsilon}{N}$  e  $\mathbf{x}^2 = \left(\sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i\right)^2$ , sendo que  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^2$ . Então a equação (3.25) se torna

$$J = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cdots \int_{-\pi}^{\pi} \prod_{i=1}^N d\theta_i \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\mathbf{y}^2 + \sqrt{2\mu} \sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{y}\right) d\mathbf{y}.$$

Rearranjando as duas integrais acima, podemos fatorizar uma integração sobre todas as coordenadas espaciais das  $N$  partículas. Ademais, vamos considerar o reescalonamento  $\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{y} \sqrt{\frac{N}{2\beta\epsilon}}$  e realizar a integração, então obtemos

$$J = \frac{1}{\pi} \frac{N}{2\beta\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-N \left[\frac{y^2}{2\beta\epsilon} - \ln(2\pi I_0(y))\right]\right) d\mathbf{y}. \quad (3.26)$$

Na equação (3.26)  $y$  é o módulo do vetor  $\mathbf{y}$  e  $I_0$  é função de Bessel modificada de ordem zero.

Portanto, para obter a forma final da função de partição  $Z(\beta, N)$  devemos adicionar o resultado de (3.26) em (3.24), realizando assim a parte configuracional e considerar as contribuições do termo cinético. Para obter todas as informações termodinâmicas necessárias, calcularemos a energia livre que é dada como

$$F = - \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{\beta N} \ln Z \right).$$

Considerando a função de partição obtida pela definição (3.23) e utilizando o método de LaPlace, obtemos a energia livre

$$F(\beta, N) = \frac{1}{2\beta} \left( x_1 \ln \frac{2\pi m_1}{\beta} + x_2 \ln \frac{2\pi m_2}{\beta} \right) - \frac{\epsilon}{2} + \frac{1}{\beta} \max_y \left( -\frac{y^2}{2\beta\epsilon} + \ln(2\pi I_0(y)) \right), \quad (3.27)$$

na equação (3.27) representamos o termo  $x_i = \frac{N_i}{N}$ , sendo  $i = 1, 2$ . Portanto, é necessário encontrar um valor de máximo para  $y$  (3.27). Como  $y \geq 0$  temos três possíveis pontos de máximo  $y = 0$ ,  $y = +\infty$  e  $0 < y < \infty$ , onde a derivada em relação a  $y$  será sempre nula. Não consideraremos o terceiro devido ao comportamento da função de Bessel no infinito. Desta forma, o caso em que  $y = 0$  há o ponto onde encontramos o máximo de  $y$ . Dadas as condições de máximos, escrevemos a condição de consistência como

$$\frac{y}{\epsilon\beta} = \frac{I_1(y)}{I_0(y)}. \quad (3.28)$$

Quando consideremos que  $\epsilon\beta < 2$  teremos a solução com magnetização nula [43]. Quando considerado  $\epsilon\beta > 2$  teremos valores não nulos para a magnetização dependendo do valor de  $y$  [43].

A partir da equação (3.28) podemos escrever uma equação auto-consistente à magnetização escrita como

$$M = \epsilon \frac{I_1(\bar{y})}{I_0(\bar{y})}. \quad (3.29)$$

Consideramos  $\bar{y}$  como solução da equação (3.29). Para o caso repulsivo ( $\epsilon = -1$ ) a expressão da magnetização admite apenas valores de  $M = 0$ , o que garantirá que o sistema alcançará o estado homogêneo de equilíbrio. Porém, quando analisamos o caso atrativo ( $\epsilon = 1$ ), a equação

(3.29) admite solução diferente da trivial,  $M \neq 0$  [43]. Além do mais, como parâmetro de ordem, a magnetização apresenta uma transição de fase de segunda ordem, relatamos a existência de uma temperatura crítica  $T_c = \beta_c^{-1} = \left\langle \frac{p^2}{2m_i} \right\rangle = \frac{1}{2}$  e de acordo com (3.22) também existe uma energia crítica por partícula  $U_c = \frac{3}{4}$  [43], servindo como um indicador para os possíveis estados do sistema: homogêneo de equilíbrio ( $M = 0$ ) e aglomerados, onde ( $0 < M < 1$ ).

### Análise do espaço cinético

Para uma melhor compreensão da dinâmica, consideramos as seguintes situações

- Quando  $U > U_c$  as partículas têm energia cinética para percorrer todo o círculo, *caso supercrítico*. Quando se parte de uma distribuição uniforme a magnetização oscilará em torno de zero, com o sistema permanecendo no estado homogêneo.
- Para energias  $U < U_c$  denominamos o *caso subcrítico*, onde observamos a formação de estados aglomerados no espaço cinético, devido a ressonância com o modo coletivo de  $\mathbf{M}$ .

Uma maneira que facilita o entendimento dos casos supercrítico e subcrítico é a análise da equação (3.21) que coincide com a equação do pêndulo (com amplitude determinada por  $M$ ). Escrevemos a energia individual de uma partícula<sup>5</sup> como

$$e_i = \frac{p_i^2}{2m_i} + 1 - M \cos(\theta_i - \varphi). \quad (3.30)$$

Como o retrato de fase de um pêndulo apresenta uma separatriz e dessa forma obtemos os valores máximo e mínimo ao momento linear

$$\frac{p}{\sqrt{m_i}} = \pm \sqrt{2M [1 + \cos(\theta - \varphi)]}, \quad (3.31)$$

sendo esta a definição da separatriz ao sistema cosHMF. Assim, observamos que a largura da separatriz<sup>6</sup> para o movimento de um pêndulo (3.21) é escrita como  $2\sqrt{M}$  e sua energia repre-

<sup>5</sup>Esta definição de energia se difere da definição de energia média por partículas dada em (3.22), uma vez que a soma de todas partículas por (3.30) não reproduz o mesmo resultado dado por (3.22).

<sup>6</sup>Quando desejamos observar a largura da separatriz e quando consideramos um sistema de massas diferentes, podemos analisar a separatriz de duas maneiras, a primeira como está representada na variável (3.31), ou  $p = \pm \sqrt{2m_i M [1 + \cos(\theta - \varphi)]}$ . Quando analisamos a primeira variável, todas as partículas terão mesma largura de separatriz, quando analisamos a segunda teremos larguras diferentes para separatriz, onde as partículas mais leves terão separatriz de menor largura. Outra maneira de analisar a separatriz é considerando a velocidade, neste caso a variável da separatriz terá duas formas, sendo

sentada por  $E_s = (1 + M)$ . Desta maneira, a separatriz possibilitará dois tipos de trajetórias de acordo com a energia individual  $e_i$  de uma dada partícula  $i$ , são as condições

- Para  $e_i > E_s$  as partículas serão denominadas *partículas de alta energia – PAE*, visitando todo o círculo. O valor de  $p_i$  nunca será nulo e seu sinal é dado pelas condições iniciais;
- Para  $e_i < E_s$  as partículas são ditas como *partículas de baixa energia – PBE*, com seu movimento confinado no interior da separatriz. O valor de  $p_i$  será nulo para dois valores do ângulo  $\theta_i$ , sendo seu módulo limitado pela largura da separatriz  $|p_i|/\sqrt{m_i} \leq 2\sqrt{M}$ . Desta maneira, observamos que trajetória será elíptica no espaço de fase, além de simétrica próximo de  $p_i = 0$ .

Portanto, dentro do *caso supercrítico*, quando consideramos PAE,  $e_i > E_s$ , a largura da separatriz sempre será nula, com as partículas visitando todo os espaços do círculo.

Já para o *caso subcrítico*, observamos numericamente dois tipos de regiões no retrato do espaço cinético – EC, onde uma PBE poderá visitar. Uma primeira região que denominamos *região subcrítica confinada – RSC*, onde as partículas tendem a se concentrar em um aglomerado com energia cinética finita. A outra região denominamos de *região subcrítica de translação – RST*, para tal, é necessário que uma dada PBE tenha o valor da energia próximo de  $U_c$ , obtendo energia suficiente para permanecer fora do aglomerado de partículas, mas abaixo da linha que determina a largura da separatriz.

### 3.2.2 Implementação numérica do modelo cosHMF

Um ponto muito importante na análise deste trabalho é a implementação de alguns métodos numéricos. Sabemos que muitos problemas em ciência têm soluções analíticas exatas, mas uma grande gama de problemas apresentam certas dificuldades para a obtenção destas soluções. Portanto, os métodos numéricos são bastante úteis. Para a integração numérica do sistema cosHMF, utilizaremos um integrador simplético de segunda ordem, conhecido como *leapfrog* (ou pulo do sapo). A utilização de integradores simpléticos é útil, pois são métodos capazes de preservar quantidades canônicas de um sistema hamiltoniano, como a energia [78, 79].

a primeira  $v\sqrt{m_i} = \pm\sqrt{2M[1 + \cos(\theta - \varphi)]}$ , desta maneira todas as partículas terão a mesma largura de separatriz, já a outra representação da velocidade é escrita como  $v = \pm\sqrt{\frac{2M[1 + \cos(\theta - \varphi)]}{m_i}}$ , onde as partículas mais leves terão a separatriz mais larga. Neste trabalho sempre consideraremos a variável da separatriz como  $u = \frac{p}{\sqrt{m_i}} = v\sqrt{m_i}$ .

Quando consideramos um sistema hamiltoniano descrito por  $H(q, p)$ , o método leapfrog consiste basicamente em uma atualização parcial da posição  $q$  no passo de tempo, seguida de uma completa atualização ao valor do momento  $p$  (ou velocidade) e novamente a atualização parcial da posição, podendo ser representando como

$$\begin{aligned} t_{k+1/2} &= t_k + \frac{h}{2} \\ q_{k+1/2} &= q_k + p_k \frac{h}{2} \\ p_{k+1} &= p_k + F(q_{k+1/2}, t_{k+1/2}) h \end{aligned} \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned} q_{k+1} &= q_{k+1/2} + p_{k+1} \frac{h}{2}, \\ t_{k+1} &= t_{k+1/2} + \frac{h}{2}, \end{aligned} \quad (3.33)$$

sendo  $h$  o passo de interação,  $t$  o tempo e  $F$  a força.

Portanto, para implementar a integração numérica do modelo cosHMF é necessário integrar as equações de movimento (3.18) às  $N$  partículas do sistema. Porém um fator muito importante é a maneira como escolhemos as condições iniciais do sistema, pois como já mencionamos, sistema com interação de longo alcance são sensíveis a tais escolhas. Uma distribuição inicial de partícula bem usual ao modelo cosHMF é a conhecida distribuição *waterbag* [52, 71], onde definimos a condição inicial de posição e momento de acordo com a seguinte distribuição

$$f(\theta, p, t = 0) = \begin{cases} \frac{1}{2\Delta\theta\Delta p}, & \text{se } -\Delta\theta < \theta_i \leq \Delta\theta, |p| \leq \Delta p \\ 0, & \text{se } |p| > \Delta p, \Delta\theta < \theta < -\Delta\theta \end{cases}. \quad (3.34)$$

Ademais, uma vez definida a função de distribuição, podemos calcular o valor inicial da magnetização, bem como o valor inicial da energia por partículas, que escrevemos como

$$M_0 = \frac{\left[ (1 - \cos \Delta\theta)^2 + (\sin \Delta\theta)^2 \right]^{1/2}}{\Delta\theta}. \quad (3.35)$$

A equação (3.35) é obtida somando as componentes  $M_x, M_y$ , que são calculadas de maneira contínua como  $M_x = \int d\theta dp f(\theta, p, t) \cos(\theta)$  e  $M_y = \int d\theta dp f(\theta, p, t) \sin(\theta)$  no instante  $t = 0$ . Já a energia por partícula  $H/N$  é dada como

$$\frac{H}{N} = \frac{\Delta p}{12} + \frac{(1 - M_0^2)}{2}. \quad (3.36)$$

A partir da equação (3.36) podemos definir o valor de  $\Delta p = \sqrt{6e - 3}$  [52, 71]. Apresentamos a distribuição waterbag na figura 3.10.

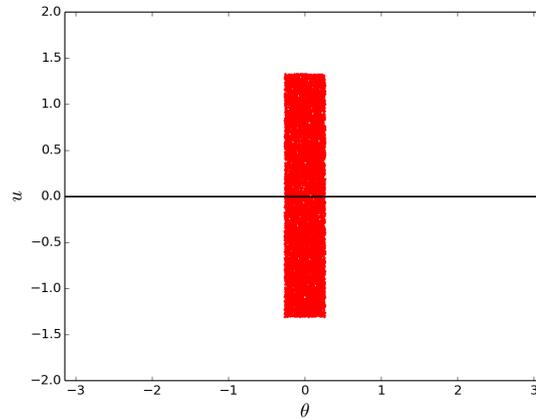


Figura 3.10: Distribuição inicial waterbag, sistema composto por  $N = 10000$  partículas e energia inicial  $U \simeq 0.3$ . Nesta distribuição foi escolhido um  $\Delta\theta$  próximo de 0. Devido a esta distribuição homogênea temos um alto valor de magnetização  $M = 0.98$ .

Por tanto, quando realizamos a integração numérica do sistema cosHMF realizamos precisamente os seguintes procedimentos

1. Inicialização do sistema (condição waterbag).
2. Atualização da posição, com meio passo no tempo para velocidade, isto implica  $\theta(t) = \theta_0 + \frac{pt}{2}$ .
3. Calcula-se a força.
4. Atualiza-se o momento com um passo completo no tempo  $p(t) = p_0 + Ft$ .
5. Atualiza-se novamente a posição, como no primeiro item (ver figura 3.11).
6. Executa-se medidas físicas desejadas.
7. Retorna-se ao item 2 enquanto durar as interações da integração numérica.

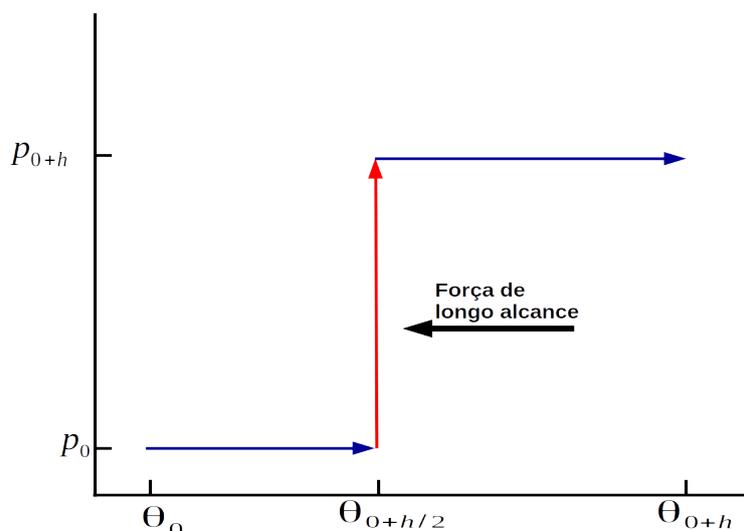


Figura 3.11: Ilustração método leapfrog para ao modelo cosHMF. Em azul destacamos os meios passos dado a posição de cada partícula, em vermelho destacamos o passo completo ao momento, que varia sob influência de uma força de longo alcance.

Seguindo os passos acima, uma das vantagens da utilização do algoritmo é podermos constatar a conservação de energia. Portanto, para verificar a acurácia deste método de dinâmica molecular, utilizamos como parâmetro a conservação de energia. Dessa forma, para medidas confiáveis, buscamos o menor erro numérico possível. Apresentamos a evolução da energia pelo tempo no apêndice A.2.2. Parte da implementação do método numérico é vista no apêndice A.2.

### 3.2.3 Resultado numéricos

Para uma melhor visualização do EC, apresentamos a figura 3.12. Primeiramente expomos um sistema de baixa energia  $U = 0.3$  nos EQE, figura 3.12a. Nesta condição, a maioria das partículas se aglomeraram formando a RSC e também observamos outra situação, partículas situadas na RST, porém, nenhuma destas partículas podem ser caracterizadas PAE, pois como é observado, nenhuma partícula tem energia maior que a energia da separatriz (figura 3.12b).

Porém, nas figuras 3.12c e 3.12e, além de observamos as RSC e RST, também verificamos uma certa quantidade de partículas além da energia da separatriz (figuras 3.12d e 3.12f), ou seja, são partículas com alta energia, capazes de percorrer todo o círculo, sendo estas enquadradas no *caso supercrítico*. Nas figuras 3.12c e 3.12d o sistema tem energia  $U = 0.5$ , portanto observamos que a maior parte das partículas transitam entre a RSC e RST, com as demais partículas além da energia da separatriz. Já nas figuras 3.12e e 3.12f, a energia do sistema é  $U = 0.69$ , onde

observamos que as partículas tendem a se aglomerarem menos, com sua maioria além da energia da separatriz.

Como sistemas de longo alcance são altamente sensíveis as condições iniciais, a energia inicial do sistema é diretamente relacionada ao modo como inicializamos o sistema. Quando escolhemos uma distribuição inicial espacialmente concentrada em torno de zero, isto implica numa alta magnetização. Desta forma, observamos o sistema em duas fases distintas, a *relaxação violenta*, período onde todas partículas têm movimento desordenado, apresentando grandes variações no módulo da magnetização. A outra fase do sistema são os EQE, com dependência no valor de  $N$  e que é caracterizada por um tempo longo de duração, até o sistema atinja o equilíbrio térmico.

Nos EQE o valor do módulo da magnetização e outras grandezas dinâmicas apresentam poucas variações. Na figura 3.13 apresentamos a evolução temporal do vetor magnetização, observando as duas fases do sistema, RV e os EQE. Vale notar que na figura os valores da magnetização são diferentes devido as diferentes energias, como o vetor magnetização aponta na direção da região com mais partículas aglomeradas, sistemas de menor energia tem maior módulo da magnetização, pois são mais aglomerativos, como observamos na figura 3.13.

Outras medidas de grande relevância ao sistema cosHMF serão apresentadas no capítulo 5.

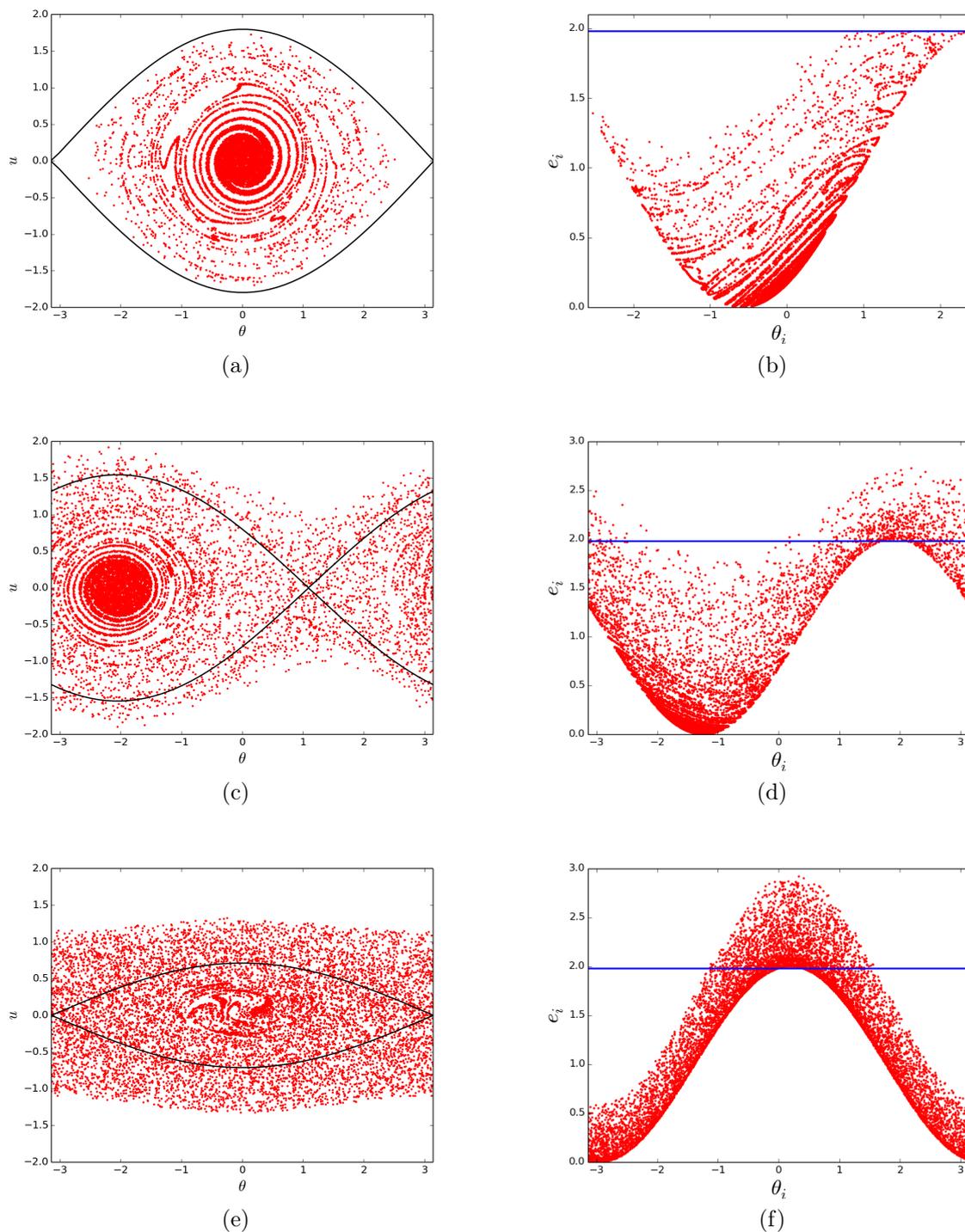


Figura 3.12: Representação do espaço cinético do sistema cosHMF no EQE e da energia individual por partícula pela posição. (a) e (b) sistema com energia  $U = 0.3$ . (c) e (d) sistema com energia  $U = 0.5$ . (e) e (f) sistema com energia  $U = 0.69$ . Sistema composto por  $N = 10000$  partículas, magnetização inicial de  $M = 0.98$  e um tempo total  $t = 500$ . As linhas em azul e preto representam a energia da separtriz.

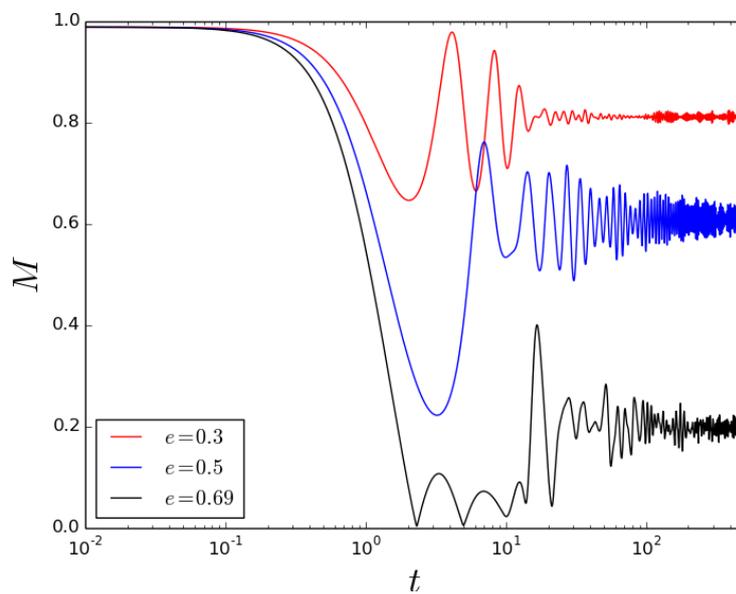


Figura 3.13: Representação da magnetização pelo tempo. Observamos a relaxação violenta no início do processo dinâmico e o início dos EQE. Simulação feita com  $N = 10000$ , tempo total  $t = 500$  e magnetização inicial  $M = 0.98$ . Foram escolhidos sistemas com energias  $U = 0.3$ ,  $U = 0.5$  e  $U = 0.69$ .

# Capítulo 4

## Sistemas de curto e longo alcance

Nos capítulos precedentes estudamos algumas propriedades dos *sistemas de curto alcance* – SCA e dos *sistemas de longo alcance* – SLA. Na figura 1.2 ilustramos algumas dessas diferenças. Como observamos, os SCA possuem interação pontual, seguindo os padrões da mecânica estatística de Boltzmann, ou seja, os sistemas sempre estão em *equilíbrio térmico*. Por outro lado, os SLA se interagem por um campo de força e não apresentam característica dos SCA, com as distribuições de suas médias diferentes da distribuição de Maxwell-Boltzmann. Além doutras questões, como a não-ergodicidade.

Como SCA e SLA apresentam uma enorme diferença entre si, uma análise interessante se faz por intermédio de sistemas mistos, ou seja, sistemas com a presença dos dois tipos de potenciais. Tal proposta impõe uma indagação, qual o potencial será predominante dado a análise das distribuições? Isto quer dizer, por exemplo, tal sistema terá um estado de equilíbrio termodinâmico? À vista disso, tal análise se faz interessante, pois possibilita uma série de comparações entre um sistema misto, com os sistemas de curto e longo alcance.

Apesar de não serem muito estudados, sistemas mistos já datam algumas décadas, ao modelo de Ising com interação de campo médio (Curie-Weiss), temos os trabalhos [80, 81, 82] que consideram as interações entre os vizinhos mais próximos de cada spin, com a solução do ensemble canônico em [80]. A solução microcanônica para esse sistema misto foi publicada mais recentemente em [57]. Em ambos os trabalhos citados ao modelo de Ising com termo de curto e longo alcance, observamos as características típicas dos SLA, ou seja, não equivalência de ensembles, calor específico negativo, saltos de temperatura, quebra de ergodicidade e o surgimento dos EQE.

Ao modelo cosHMF alguns trabalhos já estudaram a influência do termo de curto alcance ao

sistema [14, 83, 84, 85]. Nas referências [83, 84] é adicionado um termo de curto ao alcance ao Hamiltoniano do modelo cosHMF (3.17), sendo escrito como

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

com  $\theta_{N+1} = \theta_1$ . O segundo termo na equação acima é a parcela de curto alcance, com  $K$  representando a constante de acoplamento de curto alcance. Quando  $K = 0$  recupera-se o sistema cosHMF. Para tal modelo, o termo de curto alcance não tem grande efeito significativo, pois são detectadas as mesmas características conhecidas dos SLA. Porém, um resultado interessante é quando se considera a constante  $K < 0$ , onde se observa uma transição de fase de primeira ordem.

Como o modelo cosHMF é um sistema dinâmico, a análise da formação de caos também é objeto de pesquisa por intermédio dos expoentes de Lyapunov [86]. No trabalho [87] os autores apresentam um sistema alternativo ao cosHMF, com a presença dos dois potenciais em um sistema  $2D$ , com o intuito de estudar a formação de caos e a relaxação para o equilíbrio, esse interessante sistema tem sua descrição dada pelo Hamiltoniano

$$H = H_\theta + H_\phi + \epsilon \sum_{i=1}^N \cos(\theta_i - \phi_i),$$

o termo de curto alcance é a última parcela da equação apresentada, com  $\epsilon$  sendo o parâmetro de acoplamento e quando seu valor é zero, recuperamos o modelo cosHMF bidimensional. Os termos correspondentes ao modelo cosHMF  $2D$  são dados por

$$H_\theta = \sum_{i=1}^N \frac{p_{\theta_i}^2}{2} + \frac{N}{2} (1 - M_\theta^2),$$

$$H_\phi = \sum_{i=1}^N \frac{p_{\phi_i}^2}{2} + \frac{N}{2} (1 - M_\phi^2).$$

Sendo a coordenada generalizada  $\mathbf{q}_i = \theta_i, \phi_i$  e  $M_\alpha = \langle \cos \alpha \rangle$ , com  $\alpha \in \{\theta, \phi\}$ . Neste modelo também fica evidente as características dos SLA. Com a análise dos coeficientes de Lyapunov, o trabalho propõe que sistemas menos caóticos favorece a relaxação dos EQE ao equilíbrio termodinâmico.

Há também modelos que estudam o caso inverso, a análise de um sistema tipicamente de

curto alcance, porém modificado por um termo de longo alcance atrativo ou repulsivo [88, 89]. Nestes trabalhos é estudado o resfriamento de gases granulares e com a adição do termo de longo alcance é estudada a formação de aglomerados. Quando se tem o caso atrativo, o sistema tende a formar várias regiões de aglomeração, para o caso repulsivo essas regiões têm poucas evidências. Outra análise muito interessante é a evolução da curtose das velocidades, que para o sistema misto apresenta valor diferente de 3, indicando que tais sistemas não estão em equilíbrio termodinâmico. Em ambos os trabalhos é utilizado o método *event driven* padrão à dinâmica molecular.

À vista dos parágrafos acima, esta tese tem como interesse primordial a proposição de um sistema misto. Portanto, a ideia básica consiste na *imposição de colisões ao famigerado sistema cosHMF*. Isto é proposto pelo seguinte argumento, *são os efeitos colisionais que levam os SCA a um estado de equilíbrio termodinâmico de acordo com a teoria desenvolvida por Boltzmann*. Uma vez visto que sistemas mistos tendem a se comportarem como SLA, lançamos uma simples pergunta: *colisões, podem elas mudar o não-equilíbrio termodinâmico de um sistema de longo alcance?*

Além da pergunta anterior, outros aspectos dos SLA também são interessantes a serem estudado, como a questão da difusão anômala e a quebra de ergodicidade. Dessa forma, *qual o potencial irá se prevalecer sobre o outro?* Portanto, para responder a pergunta base dessa tese, foi necessário a *criação de um novo método computacional, capaz de calcular a dinâmica de longo alcance combinado a dinâmica de colisão*. Apresentamos a seguir o modelo que denominamos de sistema *cosHMF colisional*.

## 4.1 Modelo cosHMF colisional

Considerando que no início do processo dinâmico as partículas estejam ordenadas na seguinte configuração

$$\theta_1 < \theta_2 < \dots < \theta_N, \quad (4.1)$$

sabemos que para o potencial de colisão este ordenamento é preservado pela dinâmica de colisão. No método padrão de *event driven* calculamos os próximos tempos de colisão par a par, encontra-se o menor tempo de colisão entre os pares e todas partículas são evoluídas nesse tempo, em seguida se aplica a dinâmica de colisão a um par de partículas  $i$  e  $j = i + 1$ .

Evidentemente, para o modelo cosHMF não é possível acompanhar de maneira precisa o movimento de uma partícula, o que torna impossível a implementação de colisão para o modelo. Portanto, para construir o modelo cosHMF colisional, usaremos a simples consideração que para um passo de tempo  $h$  *suficientemente pequeno*, as partículas que eventualmente colidirão estão *consideravelmente próximas uma das outras*, de forma que a força percebida por cada uma, devido ao potencial cosseno será a mesma com um pequeno erro proporcional ao passo de tempo  $h$ .

A posição de uma partícula  $i$  no modelo cosHMF pode ser escrita como

$$\theta_i(t) = \theta_i^0 + v_i^0 t + \frac{E_i(\theta_i(t)) t^2}{m_i}. \quad (4.2)$$

sendo  $\theta_i^0$  e  $v_i^0$  a posição e velocidade inicial da partícula  $i$ . A aceleração de uma dada partícula escrita como  $a_i(t) = \frac{E_i(\theta_i(t)) t^2}{m_i}$ . O termo  $E_i(\theta_i(t))$  representa o campo médio percebido por uma partícula, dado por

$$E_i(\theta_i(t)) = \frac{\epsilon}{N} (M_x \sin \theta_i(t) - M_y \cos \theta_i(t)). \quad (4.3)$$

Com  $M_x$  e  $M_y$  a definição da magnetização (3.20). Desta forma, quando consideramos a condição para que uma colisão ocorra  $\theta_i = \theta_{i+1}$ , vemos que a diferença do termo de campo médio ao par  $i$  e  $i + 1$  será nulo, de forma que esta aproximação nos permite escrever o tempo de colisão ao par de partículas  $i$  e  $i + 1$  como

$$t_{i,i+1} = -\frac{\theta_{i,i+1}^0}{v_{i,i+1}^0}, \quad (4.4)$$

onde definimos que  $\theta_{i,j}^0 \equiv \theta_i^0 - \theta_j^0$  e  $v_{i,j}^0 = v_i^0 - v_j^0$  a velocidade relativa das partículas, sendo  $v_i = p_i/m_i$ . Dada a construção física do problema, passamos a implementação numérica.

## 4.2 Método numérico ao modelo cosHMF colisional

A implementação do sistema que aqui propomos consiste basicamente na utilização de dois métodos numéricos que já citamos neste trabalho, o *leapfrog* e o *event driven otimizado*. Basicamente, alteraremos o método leapfrog, implementando a dinâmica de colisão em um de seus estágios de integração. Ilustramos nossa aproximação ao método leapfrog nos seguintes passos

1.  $v_i(t + h/2) = v_i(t) + E_i(\theta(t)) h/2m_i$ ,
2.  $\theta_i(t + h) = \theta_i(t) + [v_i(t + h/2)] h$ ,
3.  $v_i(t + h) = v_i(t + h/2) + E_i(\theta(t + h)) h/2m_i$ .

As colisões ocorrerão no intervalo de tempo  $(t, t + h)$ , sendo implementadas na subdivisão do passo número (2), a dinâmica de colisão é esquematizada da seguinte forma

- (i) Calcular o tempo de colisão entre os pares e realizar triagem do menor tempo de colisão  $(i, i + 1)$ ,
- (ii) Evoluir todas as partículas no tempo  $t_{i,i+1}$  com movimento livre<sup>1</sup> e aplicar dinâmica de colisão ao par  $(i, i + 1)$ ,
- (iii) Atualizar o array que armazena os tempos de colisão para novas posições,
- (iv) Repetição dos passos (i) ao (iii) enquanto houver colisões no intervalo de tempo  $(t, t + h)$ .

Também ressaltamos que depois do passo 3 é necessário fazer o ordenamento das partículas com objetivo de manter a ordem inicial. Apresentamos a figura 4.1 como forma pictórica do novo método numérico proposto. Quando trabalhamos com sistema de dinâmica exata (*event driven*), o ordenamento das partículas é mantido, porém, em nosso caso devido a pequenos erros numéricos (*leapfrog*), esse ordenamento pode não ser preservado, desta forma a cada colisão reordenamos as posições das partículas com algoritmo de esforço computacional proporcional a  $N$ . À vista disso, o ordenamento inicial apresentado pela equação (4.1) é mantido.

---

<sup>1</sup>Consideramos que as partículas terão movimento retilíneo uniforme, pois o passo  $h$  é suficientemente pequeno de maneira que o termo quadrático no tempo da equação (4.2) não terá contribuição significativa.

É importante ressaltar que no cálculo dos tempos de colisão, serão considerados apenas os pequenos tempos de colisão, considerando que cada colisão o array dos tempos de colisão é atualizado, o erro induzido do sistema se mantém pequeno, sendo uma ordem menor que o erro associado ao método de integração. Outra ressalva importante é a consideração do método *event driven otimizado*. Antes de iniciar a dinâmica de colisão o programa calcula todos os tempos de colisão entre os pares, uma vez que o programa entra no passo (2) do método, como a velocidade é constante nesse passo, a cada colisão entre o par  $(i, i + 1)$  em vez de recalcularmos todos os tempos de colisão entre os pares, atualizamos somente os tempos para os pares  $(i - 1, i)$ ,  $(i, i + 1)$  e  $(i + 1, i + 2)$ , substituindo-os no array designado aos tempos de colisão e evitando maiores esforços computacional.

Apresentamos no apêndice A.3 o desenvolvimento de todo o código numérico e também mostramos a conservação de energia, que serve como parâmetro de bom funcionamento do programa, visto que o sistema é conservativo.

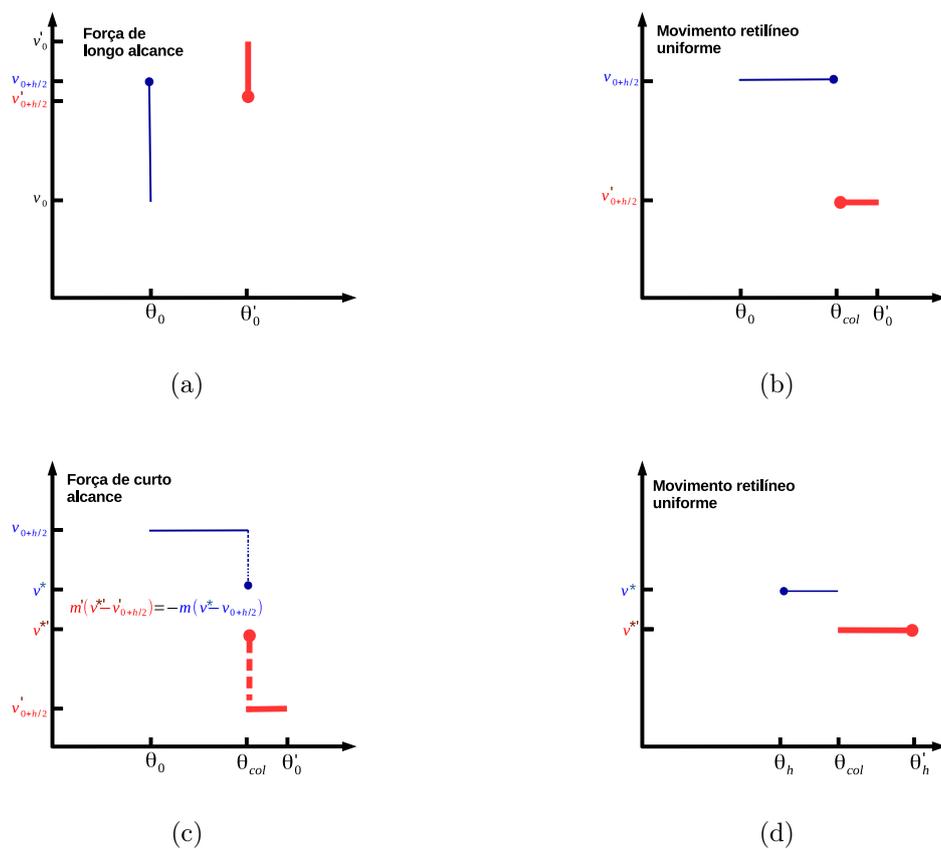


Figura 4.1: Esquematização do algoritmo implementado para o cálculo do sistema cosHMF colisional para partículas de massas diferentes, em azul partícula mais leve, em vermelha partícula mais pesada. Nas figuras (a) temos a presença da força de longo alcance. Nas figuras (b), (c) e (d) temos a presença da força de curto alcance e da dinâmica colisional. Após se retorna ao item (a) para realizar uma observação completa no tempo.

# Capítulo 5

## Resultados

Neste capítulo apresentaremos os resultados obtidos com o *novo método numérico* proposto por nós no capítulo 4. As diferenças entre os SCA e SLA já foram bem estabelecidas nesta tese. Também mostramos que sistemas mistos já foram estudados, com resultados semelhantes aos resultados oriundos dos SLA. À vista disso, mostraremos aqui os resultados obtidos para o sistema misto *cosHMF colisional*. Alguns dos resultados apresentados nesta tese são encontrados na referência [91].

Nos resultados que apresentaremos neste capítulo consideraremos sempre sistemas com massas diferentes. Tal escolha é baseada no fato de trabalharmos com um sistema unidimensional, onde colisões entre partículas de mesmas massas trocam apenas os módulos de suas velocidades, não sendo capazes de randomizar a distribuição de velocidades do sistema durante o período da dinâmica. Portanto, a análise de sistemas com partículas de mesmas massas não é útil, pois desejamos observar efeitos causados pela variação de velocidade a cada evento colisional.

Um sistema com partículas de massas diferentes também já foi estudado para o modelo *cosHMF* em [90], apresentando o interessante fenômeno de segregação de massas. Apresentaremos a análise do espaço cinético ao sistema *cosHMF*, na tentativa de observar o fenômeno de segregação de massas e também a análise do espaço cinético ao sistema *cosHMF colisional*, com intuito de observar o efeito de colisões quando traçado<sup>1</sup>  $u = v\sqrt{m}$  e  $\theta$ . Ademais, mostraremos a comparação do parâmetro de ordem magnetização entre os dois sistemas, observando as possíveis diferenças, pois o mesmo serve com indicador de formação de aglomerados.

A pergunta que motiva esta tese foi apresentada no capítulo 4 e vamos repeti-la: *colisões*

---

<sup>1</sup>O termo  $u$  não se relaciona com a energia média por partículas  $U$ .

*podem mudar o não-equilíbrio termodinâmico de um sistema de longo alcance?* Para apresentar tal resposta, utilizaremos a análise dos momentos estatísticos e por intermédio da curtoses, analisamos a termalização do sistema misto proposto. Escolhemos a curtoses como parâmetro de verificação, pois se seu valor for 3 isso é um indicativo de uma distribuição gaussiana, portanto, sistemas que apresentam tal valor, são sistemas considerados em equilíbrio termodinâmico.

Para medir a correlação entre as velocidades das partículas, lembramos que de acordo com o teorema do limite central, a distribuição de uma soma de  $n$  variáveis aleatórias independentes  $x_i$ ,  $X^{(n)} = \sum_{i=1}^n x_i$  converge para uma distribuição gaussiana quando consideramos o limite  $n \rightarrow \infty$ . Desta forma, verificamos o desvio de uma variável aleatória  $X^{(n)}$  pelo cálculo da curtoses, que definimos como

$$\mathcal{K} = \left\langle \frac{(X^{(n)} - \langle X^{(n)} \rangle)^4}{\sigma_{X^{(n)}}^4} \right\rangle, \quad (5.1)$$

sendo simplesmente o quarto momento estatístico sobre o quadrado do segundo momento estatístico, a variância.

Uma maneira interessante de analisar os resultados obtidos com o novo método numérico é por intermédio de comparações com os sistemas já conhecidos, cosHMF e sistema colisional. Referente as medidas estatísticas, apresentaremos os resultados em duas seções, uma seção para medidas de uma única *partícula teste* e outra seção para o *conjunto de partículas*, com resultados aos três sistemas estudados. A análise do conjunto de partículas e de uma única partícula teste se faz interessante, pois nos ajuda a compreender algumas questões importantes da mecânica estatística como a ergodicidade, que para ser verificada, devemos obter os mesmos valores médios quando comparamos partícula teste e o conjunto de partículas.

Desta forma, passamos agora aos resultados na expectativa de descobrir *o caminho para o equilíbrio termodinâmico do sistema cosHMF colisional e qual o potencial irá se prevalecer sobre o outro (curto ou longo alcance) no sistema cosHMF colisional.*

## 5.1 Medidas sobre o conjunto de partículas

Começaremos expor os resultados pelas medidas realizadas ao conjunto de partículas que serão apresentadas em duas subseções, primeiramente analisaremos o espaço cinético e suas regiões de aglomeração, em seguida analisaremos a questão da termalização por intermédio dos resultados numéricos da curtoses.

### 5.1.1 Espaço cinético e magnetização

Uma análise interessante a ser feita é o cálculo do espaço cinético, como apresentado no capítulo 3. Analisaremos o espaço cinético de maneira similar às das figuras contidas em 3.12. Portanto, faremos a análise para sistemas com três valores de energia  $U = 0.3$  e  $U = 0.69$ , começando com a configuração de baixa energia indo até a energia de transição da distribuição waterbag  $U_c^* = 0.69$  [52]. Nas ilustrações que apresentaremos as partículas em vermelho são menos massivas com  $m = 1$  e as partículas em azul as mais massivas com  $m = 5$ .

#### Energia 0.3

A primeira análise que apresentaremos é a simulação do sistema cosHMF e cosHMF colisional para baixa energia  $U = 0.3$  e massas diferentes, sendo vista na figura 5.1. Como visto na figura 5.1a a presença de partículas mais massivas leva ao efeito de segregação de massas, como observamos as partículas em azul tendem a formar aglomerado entre si, em região diferente das partículas menos massivas. A distribuição de partículas no espaço cinético é similar ao encontrado na figura 3.12, exceto pelo fenômeno de segregação de massa. Observamos que a maioria das partículas tendem a permanecer na RSC, com poucas partículas visitando a RST. Também se observa que as partículas mais massivas tendem a permanecerem na RSC, sendo em suas totalidades PBE de acordo com a figura 5.1b, onde vemos a maioria das partículas com energia inferior  $U = 0.5$ .

Uma primeira comparação é exibida pelas figuras 5.1c e 5.1d. Apresentamos a análise do espaço cinético ao modelo cosHMF colisional, seguindo as mesmas configurações iniciais do sistema cosHMF. Na figura 5.1c observamos grande diferença em relação a figura 5.1a. Um primeiro aspecto observado devido ao efeito de colisão é o surgimento de partículas além da energia da separatriz, fato não observado no caso convencional. Outro aspecto interessante é a mudança no formato da região de aglomeração, onde percebemos que o efeito colisional destrói o fenômeno

de segregação de massas. Como observamos na figura 5.1d algumas partículas superam a energia da separatriz, porém grande parte das partículas restam na RSC, ou seja, em aglomerado. Já as partículas que visitam a RST (região mais próxima do limite da separatriz) são vistas em menor quantidade quando comparadas com a figura 5.1b, fato que nos induz a dizer que o sistema cosHMF colisional é mais aglomerativo.

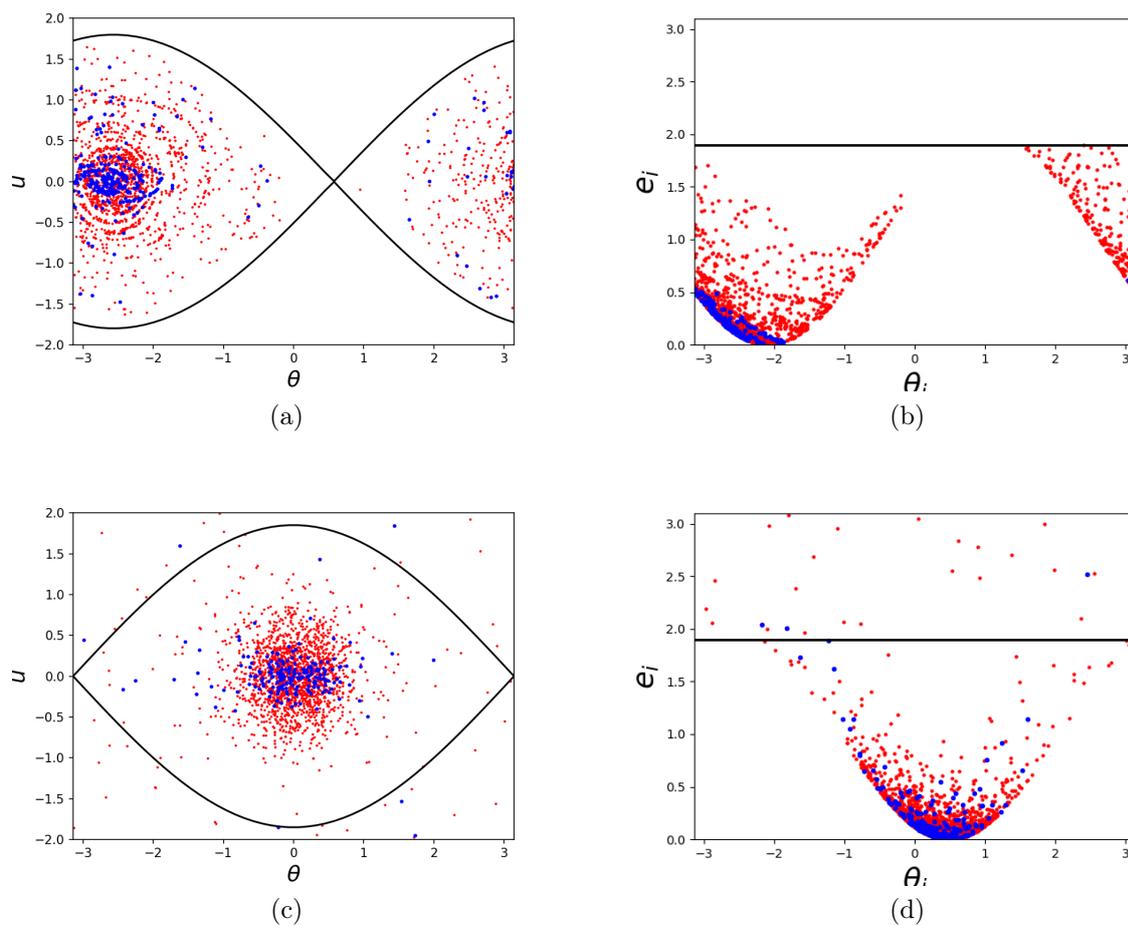


Figura 5.1: Representação do espaço cinético e da energia individual de cada partícula pela posição dos modelos cosHMF e cosHMF colisional para energia  $U = 0.3$ . (a) e (b) sistema cosHMF. (c) e (d) sistema cosHMF colisional. Simulação com  $N = 2000$  partículas, sendo 200 partículas de massa  $m = 5$ , tempo de simulação  $t = 500$ .

**Energia 0.69**

A última análise referente ao espaço cinético é para sistema com energia  $U = 0.69$ . Com o sistema mais energético grande parte das partículas tendem a visitar todo o círculo, como visto na figura 5.2.

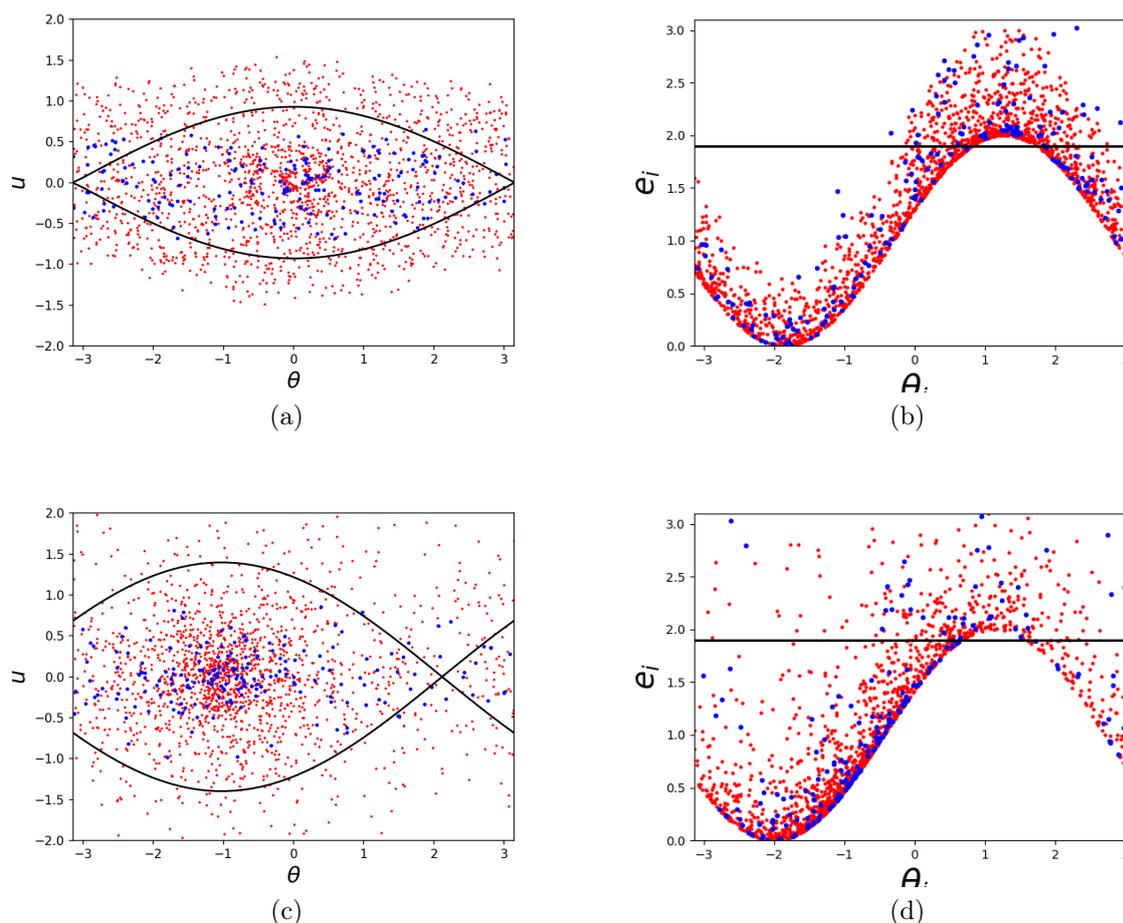


Figura 5.2: Representação do espaço cinético e da energia individual de cada partícula pela posição dos modelos cosHMF e cosHMF colisional para energia  $U = 0.69$ . (a) e (b) sistema cosHMF. (c) e (d) sistema cosHMF colisional. Simulação com  $N = 2000$  partículas, sendo 200 partículas de massa  $m = 5$ , tempo de simulação  $t = 500$ .

Na figura 5.2a observamos diferenças em relação as figuras 5.1a e ???. Com o sistema mais energético grande parte das partículas visitam a região além da separatriz, mostrando que a região de aglomeração é reduzida e a RST mais visitada. Também é observado que as partículas mais massivas também tendem a visitar a região além da separatriz e RST, como visto na figura 5.2b.

A comparação com o sistema cosHMF colisional é visto nas figuras 5.2c e 5.2d. Como nos sistemas precedentes, o retrato de fase ao sistema cosHMF colisional visto na figura 5.2c se diferencia do espaço de fase do modelo cosHMF, figura 5.2a. Observamos novamente a deformação da região de aglomeração das partículas quando comparada a figura 5.2a. De acordo com a figura 5.2d observamos menor quantidade de partículas além da energia da separatriz e uma maior formação de aglomerado quando comparada com a figura 5.2b.

### Regiões de aglomerados e magnetização

Como já discutido neste texto, o vetor magnetização é utilizado como um parâmetro de ordem, onde observamos uma transição de fase em segunda ordem. Além disso, o vetor magnetização é um indicativo de formação de aglomerados no espaço cinético, desta forma, sempre tem a sua fase apontando à região de maior aglomeração de partículas. Como observado nas figuras 5.1c, ?? e 5.2c, o sistema cosHMF colisional apresenta desmanche na região de aglomerados quebrando o efeito de segregação de massas, o que no induz a concluir que podemos observar mudanças no vetor magnetização em comparação ao sistema cosHMF. À vista disso, apresentamos o cálculo da evolução temporal do vetor magnetização aos sistemas cosHMF e cosHMF colisional na figura 5.3.

Observamos nas figuras 5.3a, 5.3b e 5.3c duas medidas para magnetização, referentes ao sistema cosHMF e cosHMF colisional. Como visto nas figuras, o módulo do vetor magnetização para o caso colisional (vermelho) apresenta maior valor numérico que o caso sem colisão (azul), fato que nos permite concluir que o efeito colisional induz as partículas a permanecerem em uma região de aglomeração.

Destarte, concluímos que quando analisamos o caso sem colisão todas as partículas têm o caminho médio livre sem colisões, o que permite as partículas de circular em mais regiões do anel. Já no caso colisional, cada partícula tem seu caminho médio livre interrompido por colisões, efeito que mudará a direção de velocidade das partículas a cada evento colisional, fazendo com que as partículas tendam a permanecerem confinadas entre suas vizinhas à esquerda e à direita na mesma região de aglomeração no espaço cinético, efeito característico dos SCA.

Ademais, ressaltamos que o comportamento cinético em ambos os casos são similares. Referente ao sistema cosHMF observamos o curto período de relaxação violenta e em seguida os EQE. Em respeito ao sistema cosHMF colisional, observamos o período de RV, porém, é necessários medidas físicas, como as médias sobre as velocidades para dizer se o sistema está nos EQE, o que

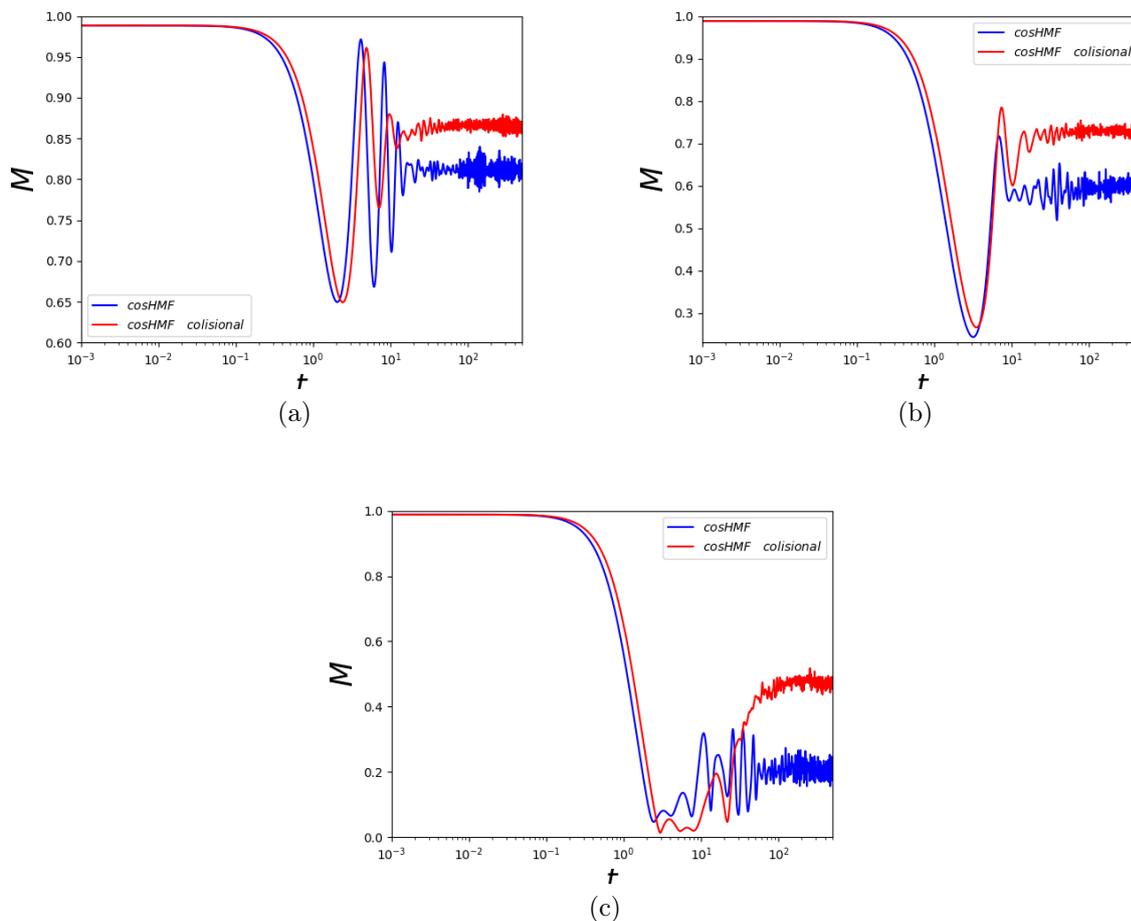


Figura 5.3: Representação do vetor magnetização *versus* o tempo. (a) Sistema de energia  $U = 0.3$ . (b): Sistema de energia  $U = 0.5$ . (c): Sistema com energia  $U = 0.69$ . Simulações realizadas com  $N = 2000$  partículas, sendo 200 partículas com massa  $m = 5$ , tempo total de simulação  $t = 500$ .

será analisado na próxima seção. Ressaltamos que em todas as simulações apresentadas observamos a conservação de energia, o que nos permite assegurar o bom funcionamento do método proposto, podendo ser vista no apêndice A.3.2.

### 5.1.2 Termalização

Vimos na seção precedente a mudança do espaço cinético do sistema cosHMF colisional, sendo este um primeiro resultado importante obtido com o novo método numérico proposto neste trabalho. Porém, o nosso desejo agora é o estudo da termalização do sistema. Para averiguar a termalização utilizaremos como parâmetro a curtoses, pois uma vez obtida curtoses de valor 3, esperamos que o sistema está em equilíbrio térmico.

Desejando obter melhor compreensão do efeito de colisões no sistema cosHMF colisional, faremos a comparação com as curtoses referentes aos sistemas colisional e cosHMF. Analisamos a termalização em seis casos diferentes. Primeiramente consideraremos sistemas com partículas de mesma massa, para averiguar que o sistema colisional muda sua distribuição de velocidades, não sendo um caso interessante ao modelo cosHMF. Em seguida apresentaremos um sistema contendo única partícula pesada de massa  $m = 5$ . Após apresentaremos sistemas compostos por 1%, 10%, 25% e 50% de partículas pesadas sobre um total de  $N = 3000$  partículas.

A análise para porcentagens diferentes é interessante, pois como trabalhamos em um sistema unidimensional, as colisões de partículas de mesma massa não surtem efeito randomizador. Desta forma, desejamos analisar o sistema variando o número de partículas mais massivas, na tentativa de observar o efeito de massa no sistema unidimensional. Aos casos com 1% e 10% de partículas mais massivas, apresentaremos as médias referentes as partículas leves e pesadas, sendo uma maneira de comparar os resultados das duas espécies de partículas com os resultados do conjunto total.

Outro aspecto importante é a consideração de diferentes valores de energia aos sistemas simulados, desta forma temos uma abrangência de resultados. Apresentaremos resultados para dois valores específicos de energia, sendo  $U = 0.69$  e  $U = 1.5$ , regime de baixa e alta energia, respectivamente. Devemos ressaltar que a escolha de dois valores de energia nos garante apenas ver as diferenças de distribuições entre o sistema cosHMF e o sistema cosHMF colisional, portanto não podemos afirmar que para os dois níveis de energia teremos resultados equivalentes, por exemplo, as temperaturas para cada sistema serão diferentes, pois por se tratar de um sistema com duas espécies de massa, o valor médio da energia cinética de cada espécie será diferente. Os resultados referentes a termalização serão feitos da seguinte forma, análise de sistemas a partir da quantidade de partículas mais massivas, sempre para dois valores de energia.

### Sistemas de partículas de massas iguais

A principal motivação à análise de sistemas com massas iguais se dá por uma simples razão, sistemas colisionais unidimensionais não são termalizáveis. À vista disso, pensamos que o sistema cosHMF colisional não sentirá os efeitos colisionais quando considerado situação apenas com uma espécie de partícula (leves). Analisaremos os sistemas colisional, cosHMF e cosHMF colisional para dois níveis de energia,  $U = 0.69$  e  $U = 1.5$ .

- $U = 0.69$

A primeira análise é dada pela figura 5.4.

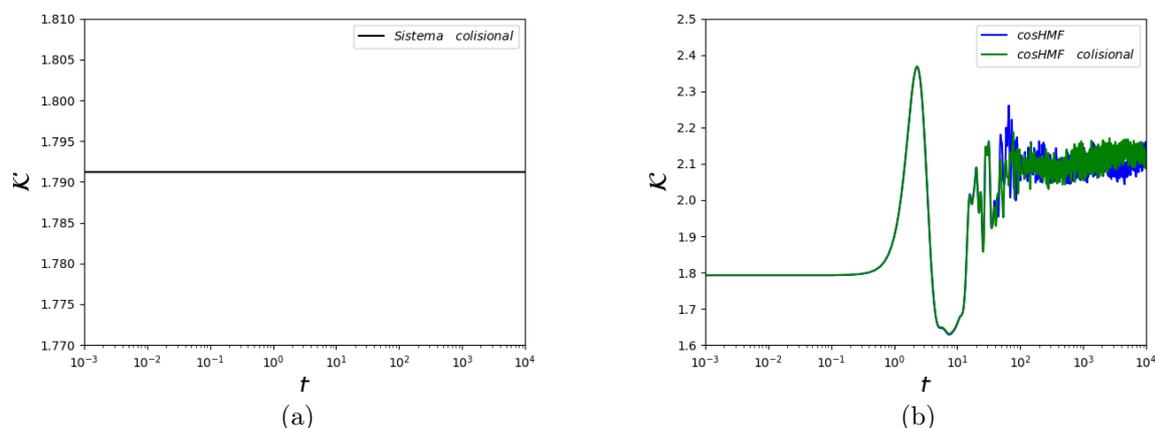


Figura 5.4: Curtoses pelo tempo aos sistemas (a) colisional, (b) cosHMF e cosHMF colisional. Energia  $U = 0.69$ ,  $N = 3000$  partículas com massas iguais. Tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ .

Como observamos na figura 5.4a, o resultado da curtoses para o sistema colisional é constante, confirmando a hipótese que sistema colisional unidimensional com partículas de mesma massa não se encontra no equilíbrio termodinâmico. O resultado referente aos sistemas cosHMF e cosHMF colisional é visto na figura 5.4b, seguindo as características padrões dos SLA, um período de RV seguido pelos EQE. O resultado referente ao sistema cosHMF colisional é basicamente o mesmo resultado do sistema cosHMF, exceto pelo erro numérico. Com isso confirmamos a necessidade de incluir massas diferentes aos sistemas analisados, pois como visto, a distribuição do sistema colisional é constante e não surte efeito no sistema proposto neste trabalho.

- $U = 1.5$

Para confirmar os resultados e interpretações obtidas pela figura 5.4 apresentamos os mesmos resultados para sistemas mais energéticos  $U = 1.5$

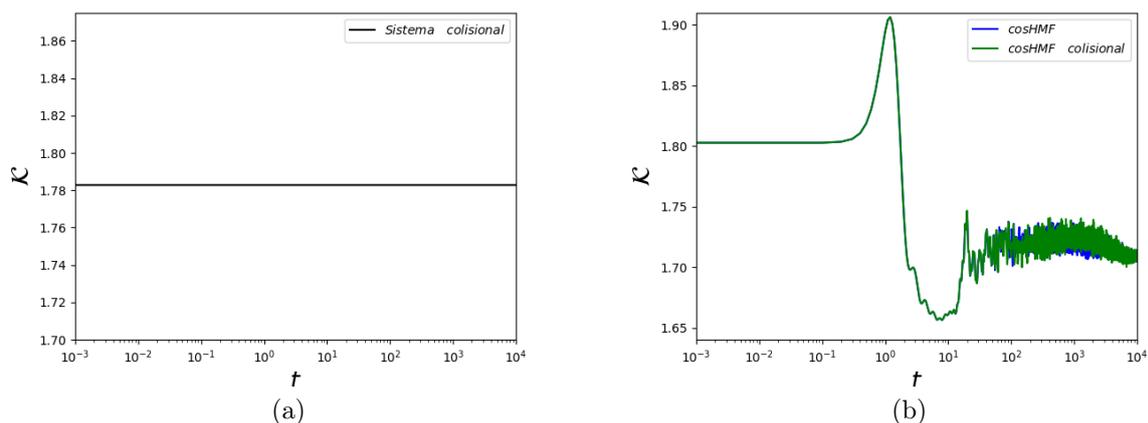


Figura 5.5: Curtoses pelo tempo aos sistemas (a) colisional, (b) cosHMF e cosHMF colisional. Energia  $U = 1.5$ ,  $N = 3000$  partículas com massas iguais. Tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ .

Os resultados apresentados pela figura 5.5 confirmam a necessidade da inserção de partículas com massas diferentes. Como observamos, o sistema colisional mantém sua distribuição constante. Já os sistemas cosHMF e cosHMF colisional têm resultados similares, provando não haver efeitos colisionais. Desta forma seguiremos à análise com partículas mais massivas.

**Sistemas de única partícula com massa  $m = 5$** 

À análise da termalização de sistemas compostos por uma única partícula massiva, apresentamos os resultados das curtoses dos sistemas colisional, cosHMF e cosHMF colisional. Em cada gráfico apresentado faremos a comparação com o sistema com partículas de massas iguais. Os resultados para sistemas de energia  $U = 0.69$  são encontrados na figura 5.6 e referente aos sistemas de energia  $U = 1.5$  na figura 5.7.

- **$U = 0.69$**

O primeiro resultado que analisamos é a figura 5.6a, onde observamos que o sistema colisional não está em equilíbrio térmico. Porém, apresentamos o comparativo com o sistema de massas iguais e observamos mudança considerável quando inserimos uma partícula mais massiva. Sistemas colisionais com mais dimensões entram em equilíbrio térmico devido aos seus choques de quina, independentemente de suas massas. Portanto, para este toy model unidimensional o efeito de massas diferentes é importante, como visto na figura 5.6a.

Na figura 5.6b o resultado para o sistema cosHMF. Como observamos, o resultado é característico dos SLA, apresentando inicialmente o período de RV seguido pelos EQE, ou seja, o sistema não se apresenta no equilíbrio termodinâmico, pois na figura a linha azul que representa a curtoses não tem valor 3 característicos dos sistemas em equilíbrio térmico. Porém, constatamos pequena mudança na curtoses quando comparada ao sistema de massas iguais, mostrando que ao sistema cosHMF a inserção de massas tem pouca influência na distribuição de velocidades, diferentemente do caso puramente colisional.

Na figura 5.6c temos o primeiro resultado referente a termalização do sistema cosHMF colisional com única massa diferente. Observamos uma mudança drástica em comparação a figura 5.4. Portanto, concluímos que sim, colisões alteram o caminho para o equilíbrio de um sistema tipicamente de longo alcance. Como visto na figura o valor da curtoses transita na região de 3 após o período de RV, fato que nos induz a dizer que para estas configurações o sistema se encontra em equilíbrio termodinâmico ou próximo dele.

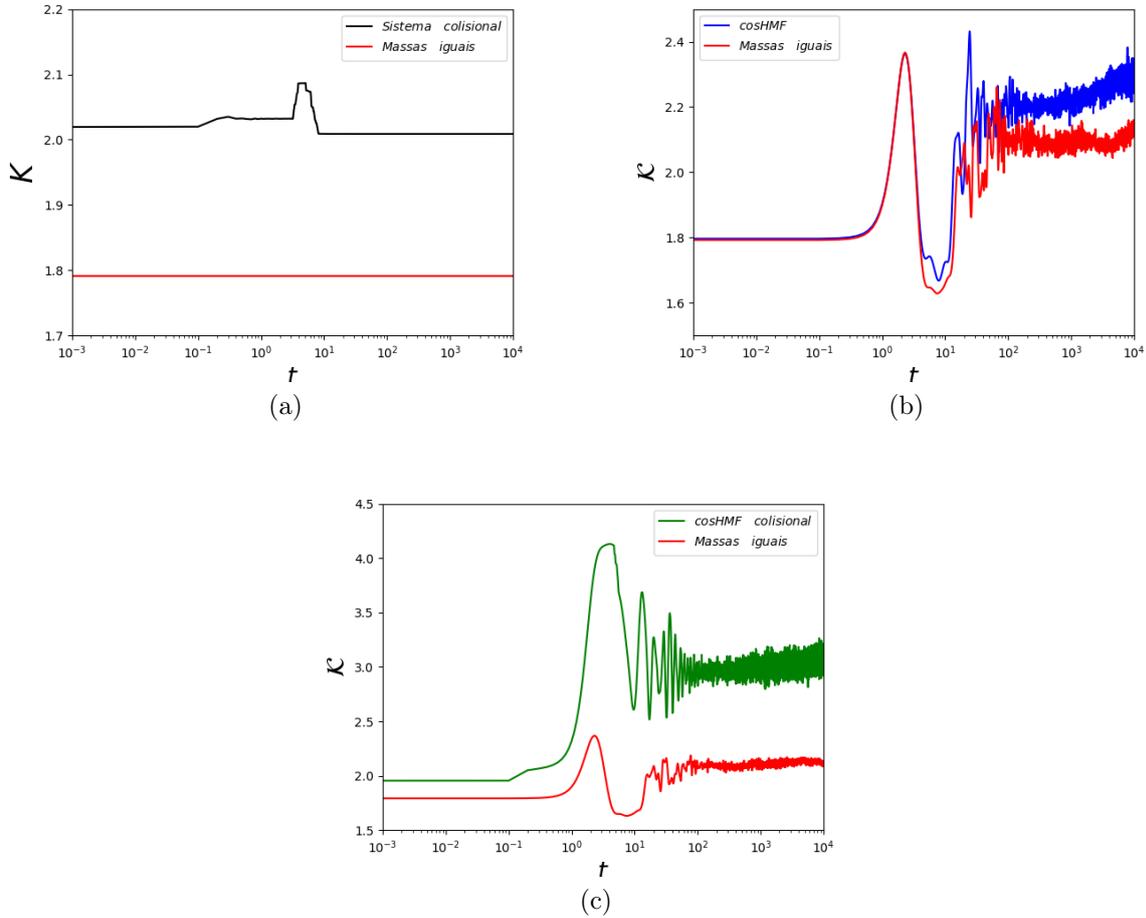


Figura 5.6: Curtoses pelo tempo aos sistemas (a) colisional, (b) cosHMF e (c) cosHMF colisional. Energia  $U = 0.69$ ,  $N = 3000$  partículas com única partícula de massa  $m = 5$ . Tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ .

A análise da figura 5.6c proporciona uma observação curiosa, o sistema cosHMF colisional se apresenta mais suscetível a termalização do que os outros dois sistemas. Mesmo o sistema colisional que é puramente de curto alcance, mas por ser unidimensional não alcança o estado de equilíbrio termodinâmico, desta forma uma primeira hipótese que podemos propor é que a termalização do sistema cosHMF colisional dependerá das contribuições de curto e longo alcance. Porém, para um melhor entendimento é necessário avaliar outros regimes energéticos, para tentar observar os mesmos resultados.

- $U = 1.5$

Outra análise pertinente é o estudo de um sistema mais energético, aqui apresentaremos resultados referentes aos três sistemas estudados, com valor de energia  $U = 1.5$ . Sabemos que

para o modelo cosHMF nesta configuração energética as partículas tendem a circular em todo o círculo estando cada vez menos correlacionadas, fato que dificulta mais ainda o sistema de atingir o equilíbrio termodinâmico. No modelo colisional para energia  $U = 0.69$  esperamos o mesmo comportamento. Mas como será o comportamento do sistema cosHMF colisional? A resposta é vista na figura 5.7.

Na figura 5.7a observamos comportamento similar ao encontrado na figura 5.6a, com o sistema permanecendo em um estado de não equilíbrio termodinâmico, mostrando mais uma vez que o efeito de única massa no sistema colisional unidimensional não é capaz de provocar a termalização, mas altera a distribuição quando comparado ao sistema de mesma massa. Porém, no sistema cosHMF, observamos pela figura 5.7b uma diferença do comportamento da curtoses em respeito a figura 5.6b. O sistema cosHMF quando mais energético apresenta menor valor de curtoses, além de se mostrar menos sensível ao efeito de massa, pois observamos na figura comportamento similar com o sistema de massas iguais.

Referente a figura 5.7c o resultado se mostra mais uma vez interessante e diferente, tanto em relação ao sistema cosHMF, como em relação a figura 5.6c. A primeira conclusão que obtemos é a confirmação que colisões alteram a distribuição de velocidades das partículas de um sistema tipicamente de longo alcance, como no caso de energia  $U = 0.69$ . Outra conclusão que podemos inferir do resultado é que o valor da distribuição de velocidades do sistema cosHMF colisional é variável de acordo com a energia do sistema. Por exemplo, na figura 5.6c o valor da curtoses sugere um sistema possivelmente termalizado, no presente resultado o valor se difere de 3, com sistema fora do equilíbrio térmico.

Até o presente momento sabemos que colisões em sistema de longo alcance têm influência na distribuição de velocidades do sistema quando acrescido partícula com massa diferente. No entanto, ainda não podemos afirmar em que nível as colisões exercem influência no valor da distribuição, mesmo observando que a mudança de distribuição do sistema colisional proporcionou grande mudança no sistema cosHMF colisional. Como vimos, nos resultados para ambos níveis de energia o sistema cosHMF e cosHMF colisional se diferem, mas o sistema puramente colisional apresenta mesmo comportamento. À vista disso, é interessante analisar um sistema com mais massas diferentes na tentativa de observar se as distribuições dos sistemas colisional e cosHMF colisional serão diferentes devido ao acréscimo de partículas mais massivas.

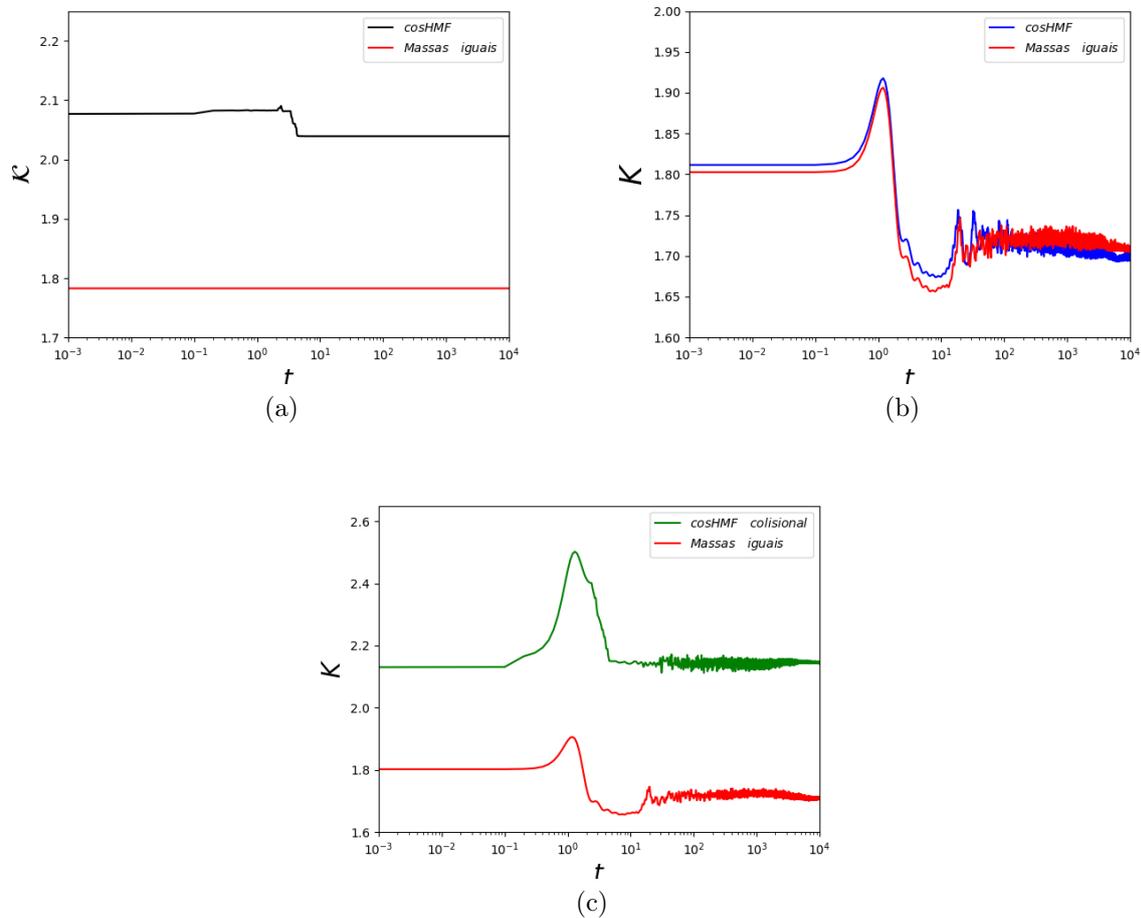


Figura 5.7: Curtoses pelo tempo aos sistemas (a) colisional, (b) cosHMF e (c) cosHMF colisional. Energia  $U = 1.5$ ,  $N = 3000$  partículas com única partícula de massa  $m = 5$ . Tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ .

**Sistemas com 1% de partículas com massa  $m = 5$** 

A ideia de aumentar a quantidade de partículas mais massivas está relacionada com a dinâmica de colisão unidimensional. Com o acréscimo de partículas mais pesadas esperamos mudanças na distribuição de velocidades do sistema colisional e com isso analisar como as possíveis alterações do sistema cosHMF colisional se correlacionam com o sistema tipicamente de curto alcance. Nesta parte do trabalho apresentaremos medidas de curtoses para o conjunto de partículas e ao subconjuntos de partículas leves e pesadas.

- **U = 0.69**

Apresentamos os resultados referentes aos sistemas colisional, cosHMF e cosHMF colisional em três figuras distintas. Começaremos nossa análise pelo sistema colisional apresentado na figura 5.8 e posteriormente os dois sistemas restantes.

O resultado apresentado pela figura 5.8a não apresenta grandes diferenças em relação ao resultado já obtido na figura 5.6a, mas vale ressaltar que o acréscimo de partículas pesadas proporciona pequena mudança no período inicial de dinâmica, apresentando variação abrupta e depois se estabilizando. Mais uma vez o sistema com massas diferentes apresenta variação em relação ao sistema homogêneo. Referente a análise dos subconjuntos de partículas, na figura 5.8b o resultado da distribuição das partículas leves apresenta grandes variações até a metade do período da dinâmica, depois se estabiliza. O mesmo comportamento é observado para o subconjunto das partículas pesadas, visto na figura 5.8c. Porém, o interessante é observar a diferença entre a distribuição do conjunto e seus subconjuntos de partículas, que apesar da diferente evolução apresentam seus valores finais na mesma região.

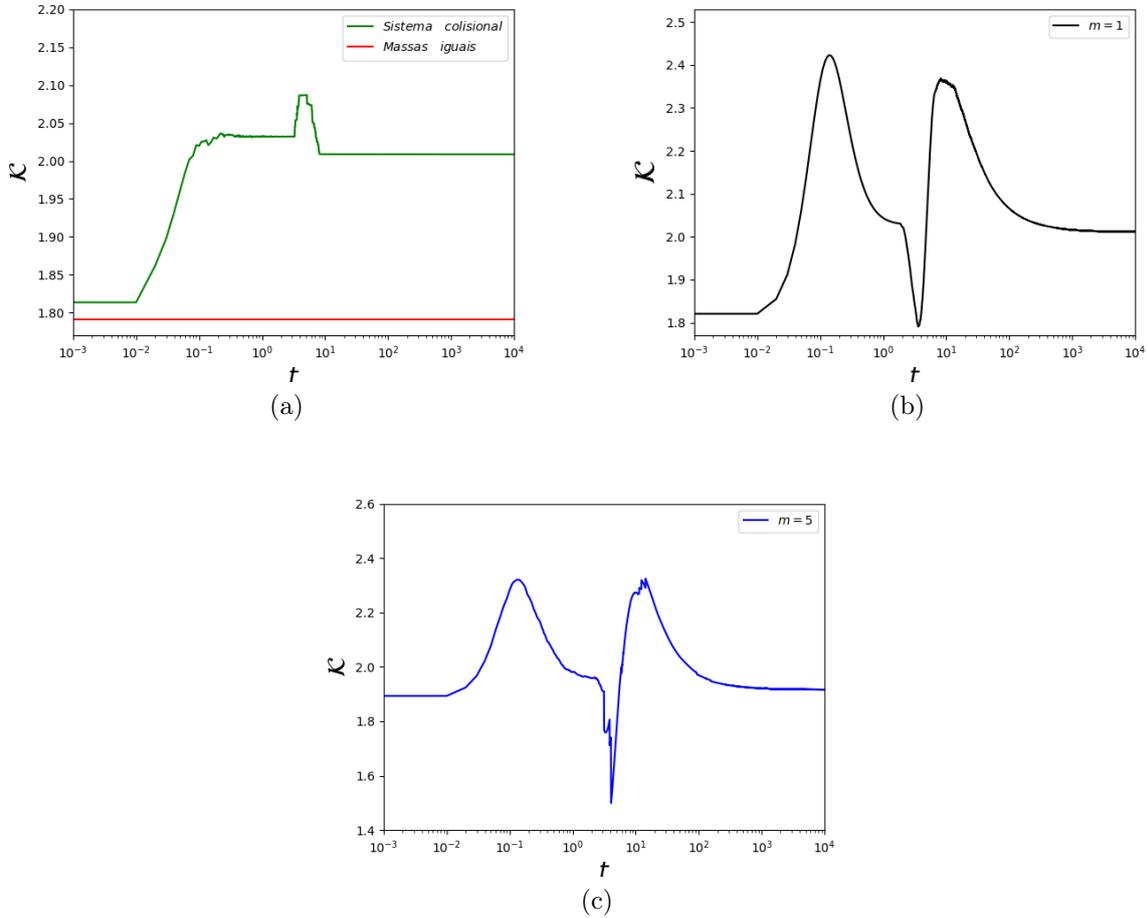


Figura 5.8: Representação da curtoses pelo tempo para o sistema colisional. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para  $N = 3000$  partículas sendo 30 com massa  $m = 5$ . Energia do sistema  $U = 0.69$  e tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ .

Ao modelo cosHMF o resultado apresentado pela figura 5.9a não mostra diferenças em relação a figura 5.6b, com mesmo comportamento de curtoses. Para esta configuração de sistema percebemos que o efeito de massas diferentes não surte grande efeito na distribuição final de velocidades para o modelo cosHMF. Por outro lado, o comportamento dos subconjuntos de partículas leves e pesadas, figuras 5.9b e 5.9c são complementes distintos entre si e em relação ao conjunto total de partículas. Porém, ambas distribuições apresentam valores acima de 3, fora de um estado de equilíbrio termodinâmico. É conhecido que os valores das distribuições de velocidades dos SLA variam com  $N$ , portanto, mesmo o sistema com 3000 partículas terá comportamento similar com o decorrer do tempo. Quanto maior o número  $N$  de partículas, maior será a duração dos EQE no modelo cosHMF, com sua distribuição de velocidades diferente de 3.

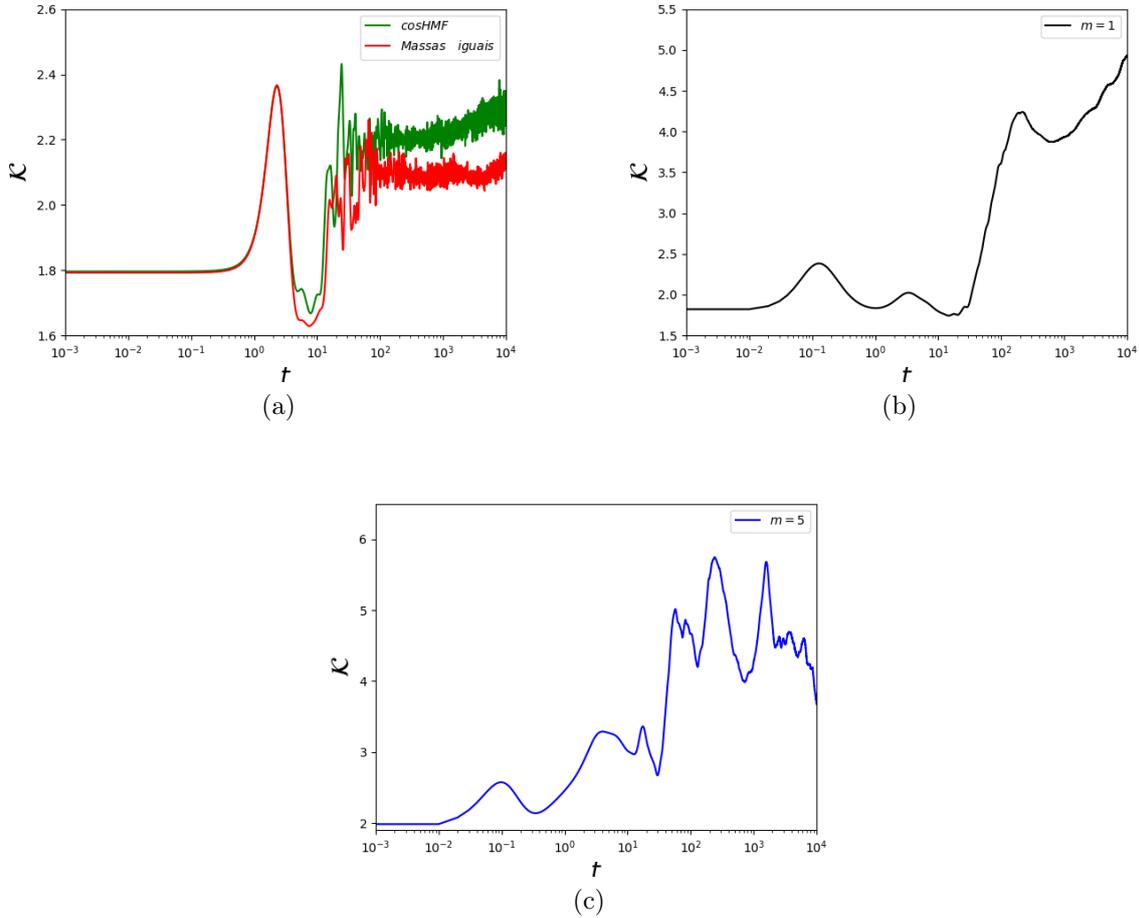


Figura 5.9: Representação da curtoses pelo tempo para o sistema cosHMF. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para  $N = 3000$  partículas sendo 30 com massa  $m = 5$ . Energia do sistema  $U = 0.69$  e tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ .

O resultado do modelo cosHMF colisional é visto na figura 5.10a, sem grandes diferenças quando comparado com a figura 5.6c, exceto por uma pequena mudança na curva no início da dinâmica, fato que podemos supor ter relação com o acréscimo de partículas pesadas, como visto na figura 5.8a, onde o sistema tem variação na curva da curtoses no mesmo período. Desta forma, apenas confirmamos a hipótese que colisões alteram a distribuição de velocidades em um sistema do tipo cosHMF, porém não podemos afirmar como cada tipo de potencial influencia em tal mudança. Como o acréscimo de massas diferentes não trouxe significativas mudanças nas figuras 5.8a, 5.9a e 5.10a em relação aos modelos com única partícula pesada, ficamos estacionados nas mesmas conclusões previamente obtidas.

Aos subconjuntos de partículas leves e pesadas os resultados apresentados nas figuras 5.10b e

5.10c são interessantes por apresentarem evoluções diferentes, mas estacionando na mesma região de valores. É curioso observar que o comportamento dos subsistemas não se assemelham com os resultados das figuras 5.8 e 5.9. De maneira geral, diríamos que esse comportamento seria típico do próprio sistema, o que talvez nos ajudasse a compreender a distribuição de velocidades do sistema cosHMF colisional, porém é necessária uma averiguação com outros níveis de energias e quantidades de partículas massivas.

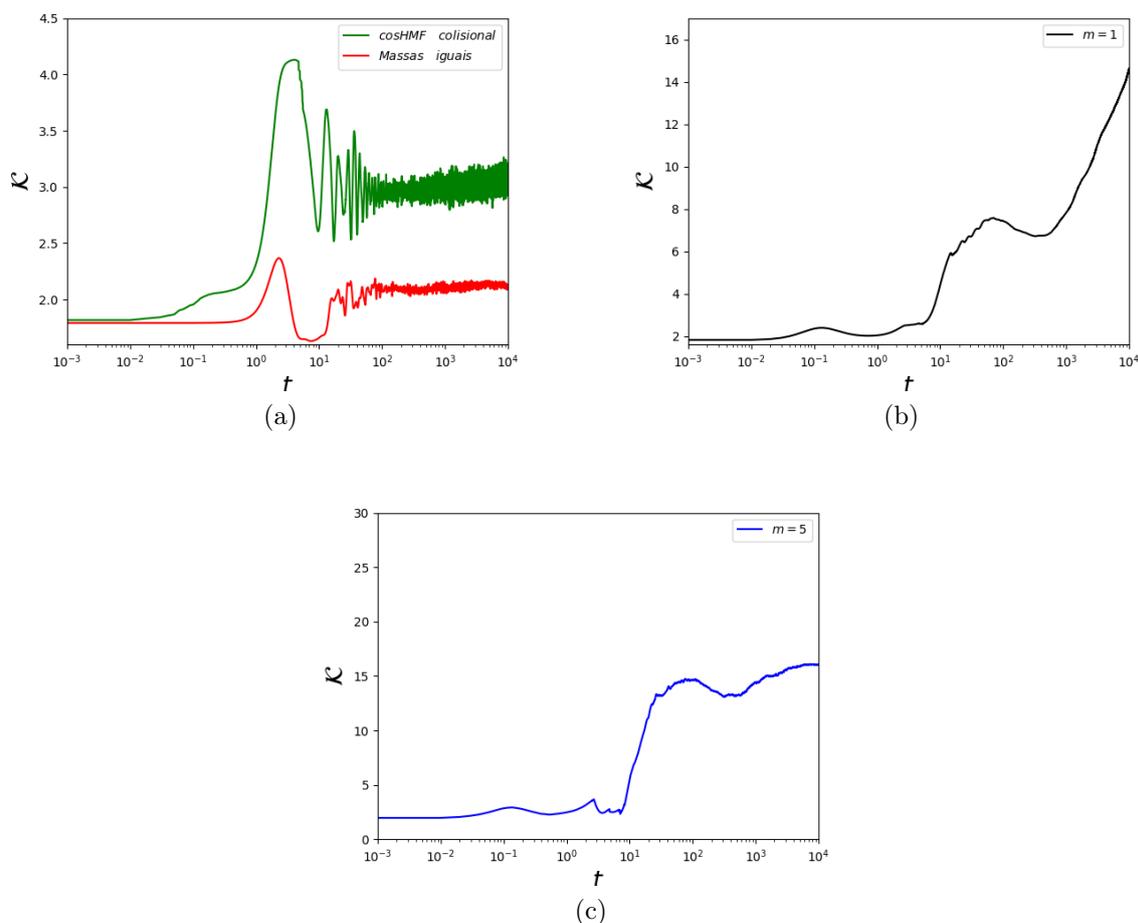


Figura 5.10: Representação da curtoses pelo tempo para o sistema cosHMF colisional. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para  $N = 3000$  partículas sendo 30 com massa  $m = 5$ . Energia do sistema  $U = 0.69$  e tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ .

- $U = 1.5$

Apresentamos o sistema mais energético  $U = 1.5$  com 1% de partículas pesadas resultados

referentes aos sistemas colisional, cosHMF e cosHMF colisional. Começaremos nossa análise pelo sistema colisional e seus subsistemas pela figura 5.11.

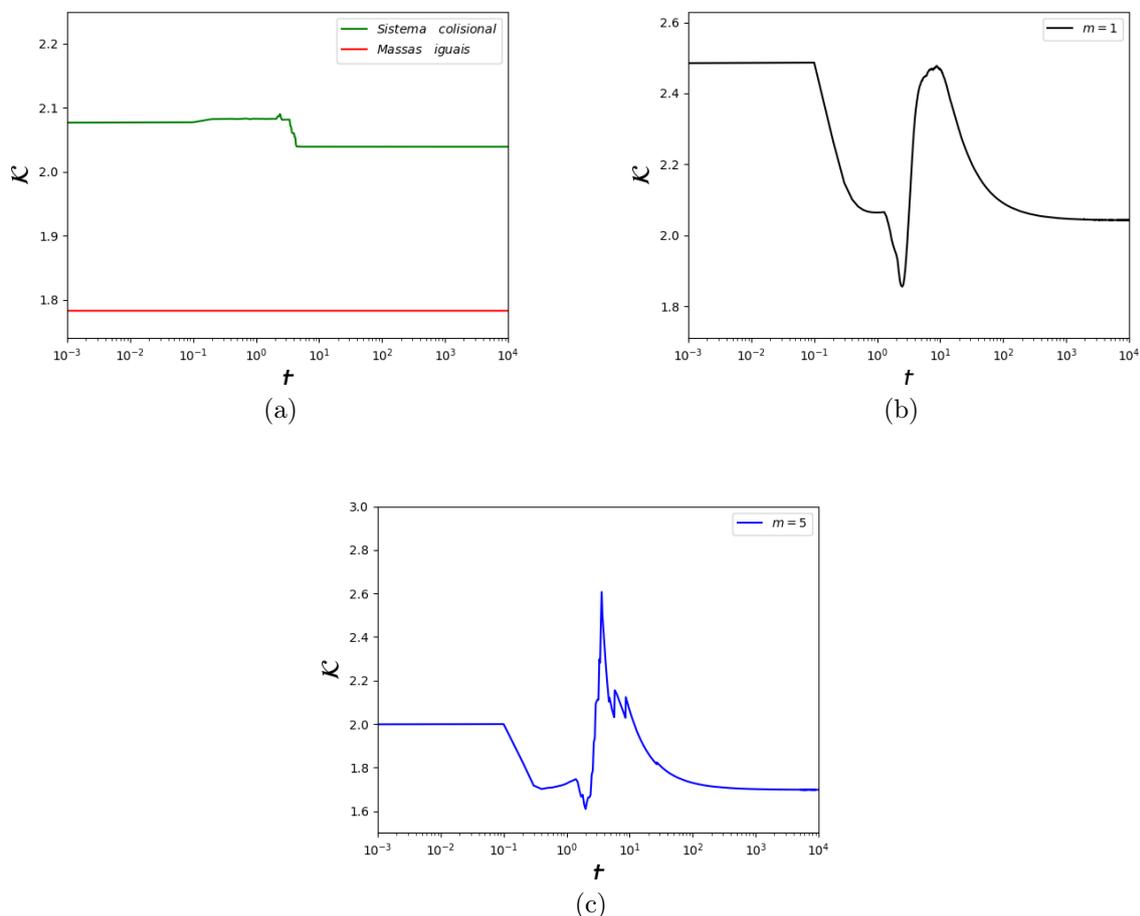


Figura 5.11: Representação da curtoses pelo tempo para o sistema colisional. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para  $N = 3000$  partículas sendo 30 com massa  $m = 5$ . Energia do sistema  $U = 1.5$  e tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ .

O resultado para o conjunto de partículas do sistema colisional apresentado na figura 5.11a é semelhante ao resultado da figura 5.7a. Desta forma concluímos que para o nível de energia  $U = 1.5$  o acréscimo de partículas massivas não tem efeito no resultado da distribuição de velocidades, igualmente no caso para sistema com única partícula massiva. Já quando olhamos os resultados dos subconjuntos de partículas, percebemos dois resultados com evoluções distintas. Na figura 5.11b o subconjunto de partículas leves tem variações na primeira parte da dinâmica depois apresentando curtoses na mesma região que o conjunto de partículas, mas fora do equilíbrio

termodinâmico. O subconjunto de partículas pesadas é visto na figura 5.11c com comportamento variável durante a dinâmica e também fora da situação de equilíbrio.

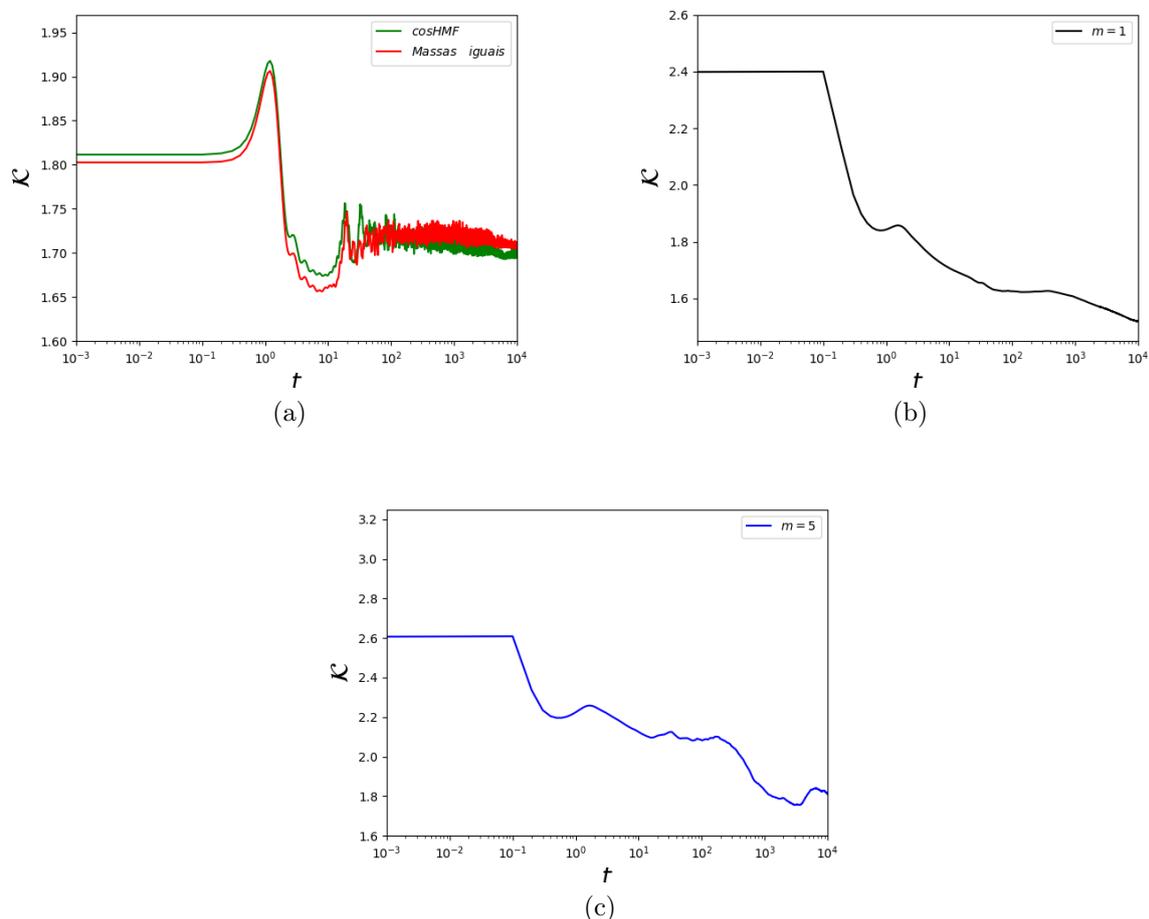


Figura 5.12: Representação da curtoses pelo tempo para o sistema cosHMF. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para  $N = 3000$  partículas sendo 30 com massa  $m = 5$ . Energia do sistema  $U = 1.5$  e tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ .

Referente ao modelo cosHMF o resultado da curtoses com o acréscimo da quantidade de partículas mais massiva é igual ao do sistema com única partícula massiva, como vemos pelas figuras 5.6b e 5.11a. Portanto, as conclusões que podemos obter sobre os resultados são as mesmas que para os sistemas com energia  $U = 0.69$ . A mudança significativa está na análise dos subconjuntos de partículas. Por exemplo, para as partículas leves, figura 5.11b, o comportamento é similar ao do conjunto do gás, com evolução da curtoses decrescente com o tempo. Comportamento similar também é visto para o subconjunto de partículas pesadas na figura 5.11c. À vista disso,

percebemos que o comportamento dos subconjuntos sistema de alta temperatura tendem a ser parecidos com o do conjunto de partículas, caso não observado na análise do sistema de baixa temperatura, havendo ambos subconjuntos comportamentos de SLA.

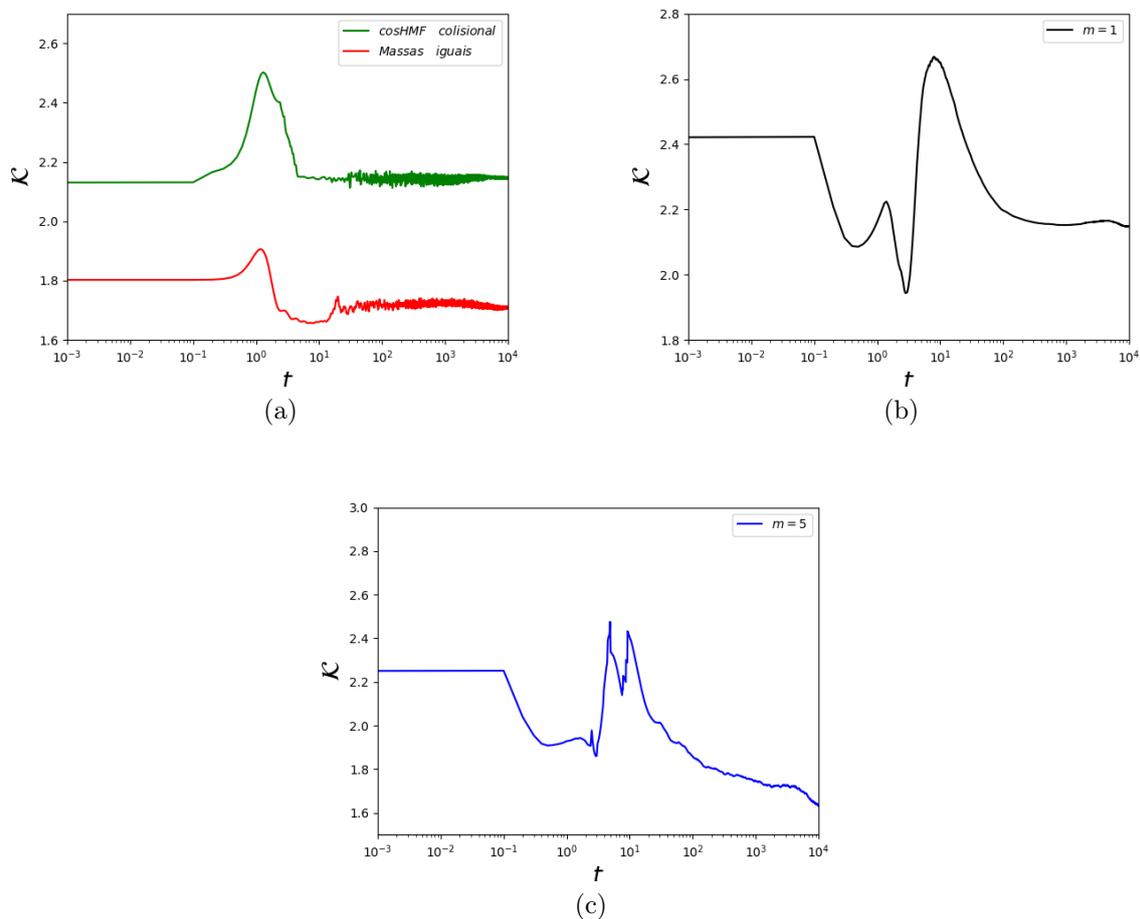


Figura 5.13: Representação da curtoses pelo tempo para o sistema cosHMF colisional. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para  $N = 3000$  partículas sendo 30 com massa  $m = 5$ . Energia do sistema  $U = 1.5$  e tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ .

O comportamento do sistema proposto por nós para energia  $U = 1.5$  e 1% de partículas pesadas, figura 5.13a, não apresenta nenhuma mudança em relação ao sistema de única partícula massiva, figura 5.7c. O sistema mais uma vez tem curtoses diferente de um sistema puramente de longo alcance e do sistema de massas iguais. Portanto, ficamos limitados até este presente momento as mesmas conclusões obtidas por intermédio da figura 5.7c. Por outro lado, os gráficos dos subconjuntos de partículas são curiosos.

Quando olhamos o comportamento do subconjunto de partículas leves, figura 5.13b temos o mesmo resultado do subconjunto para o sistema puramente colisional, figura 5.11b. O mesmo efeito também é percebido quando olhamos o subconjunto de partículas pesadas na figura 5.13c e comparamos com a figura 5.11c referente ao caso colisional. Desta forma, somos induzidos a pensar que em nível de subconjuntos de partículas o sistema cosHMF colisional tem o mesmo comportamento dos subconjuntos puramente colisional.

De fato, quando estudamos os gráficos 5.6c e 5.10a, que são sistemas de energia  $U = 0.69$ , percebemos mínimas diferenças entre as curvas no período inicial da dinâmica, talvez isso esteja ligado as diferenças apresentadas nas figuras 5.6a e 5.8a, que são sistemas de mesmas energias, mas com quantidades diferentes de massas pesadas. Desta forma, se torna bastante interessante continuar com a análise do efeito de massa sobre os sistemas, na tentativa de averiguar se o comportamento obtido nas figuras 5.13b e 5.13c se repetirão. Seguimos a análise do sistema com 10% de partículas mais massivas.

**Sistemas com 10% de partículas com massa  $m = 5$** 

Sabemos até aqui que o efeito de colisões altera a distribuição de velocidades de um sistema típico de longo alcance, desde que haja única partícula com massa diferente das demais. Tentamos entender como a quantidade de partículas com massas diferentes pode alterar o comportamento do sistema em respeito a sua distribuição de velocidades. Nos últimos resultados apresentados, vemos claramente que o sistema cosHMF colisional se distingue do sistema cosHMF. Mas os resultados apresentados não se alteram quando aumentado a quantidade de partículas mais massivas. Também percebemos que o sistema puramente colisional não atinge o equilíbrio termodinâmico, com suas distribuições similares para os casos analisados. Desta forma, acrescentaremos o número de partículas mais massivas para 10%.

- **$U = 0.69$**

A primeira análise que apresentamos para sistema com 10% de partículas pesadas será para o caso colisional, com energia  $U = 0.69$ , apresentada na figura 5.14.

Os resultados para sistema com 10% de partículas mais massivas são bastantes interessantes, a começar pelo sistema colisional. Na figura 5.14a, vemos claramente uma mudança na distribuição quando comparado aos sistemas menos massivos, figuras 5.6a e 5.8a. No presente resultado vemos a distribuição de velocidades se estacionando próximo do equilíbrio, desta forma, podemos afirmar que a quantidade de partículas com massas diferentes influencia o sistema de curto alcance unidimensional, ainda mais quando comparado ao sistema de partículas com mesma massa. Já os resultados para os subconjuntos de partículas se diferenciam dos resultados obtidos nas figuras 5.8b e 5.8c. Mas, por outro lado, vemos que o comportamento dos subconjuntos se assemelham bastante, como visto nas figuras 5.14b e 5.14c, porém com valores finais de distribuição distintos entre si.

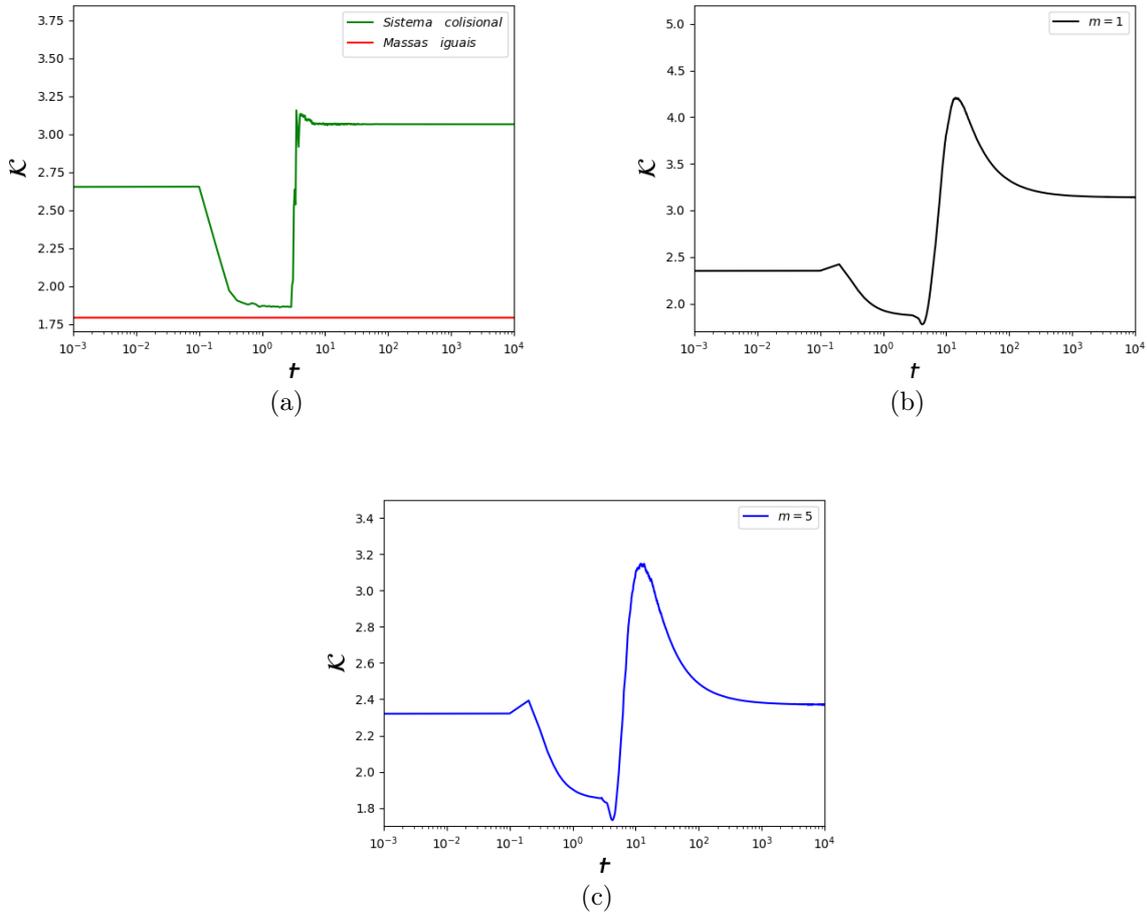


Figura 5.14: Representação da curtoses pelo tempo para o sistema colisional. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para  $N = 3000$  partículas sendo 300 com massa  $m = 5$ . Energia do sistema  $U = 0.69$  e tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ .

O resultado referente ao sistema cosHMF com 10% de partículas mais massivas também aporta novidades em relação aos resultados das figuras 5.6b e 5.9a. Aqui, vemos pela figura 5.15a que o resultado da distribuição de velocidade permanece fora do estado de equilíbrio termodinâmico, mas com valor próximo da região de curtoses 2.8, enquanto os resultados precedentes apresentam curtoses na região de 2.1 e 2.3. Percebemos que o efeito de massa tem mais relevância quando comparado ao sistema simples, porém tal mudança é mínima quando comparada as mudanças sofridas pelo sistema puramente colisional. Os resultados dos subconjuntos de partículas apresentados nas figuras 5.15b e 5.15c mostram que os subconjuntos se comportam como dois sistemas cosHMF independentes, com alto valor de curtoses, como havíamos constatados e discutido nas figuras 5.9b e 5.9c.

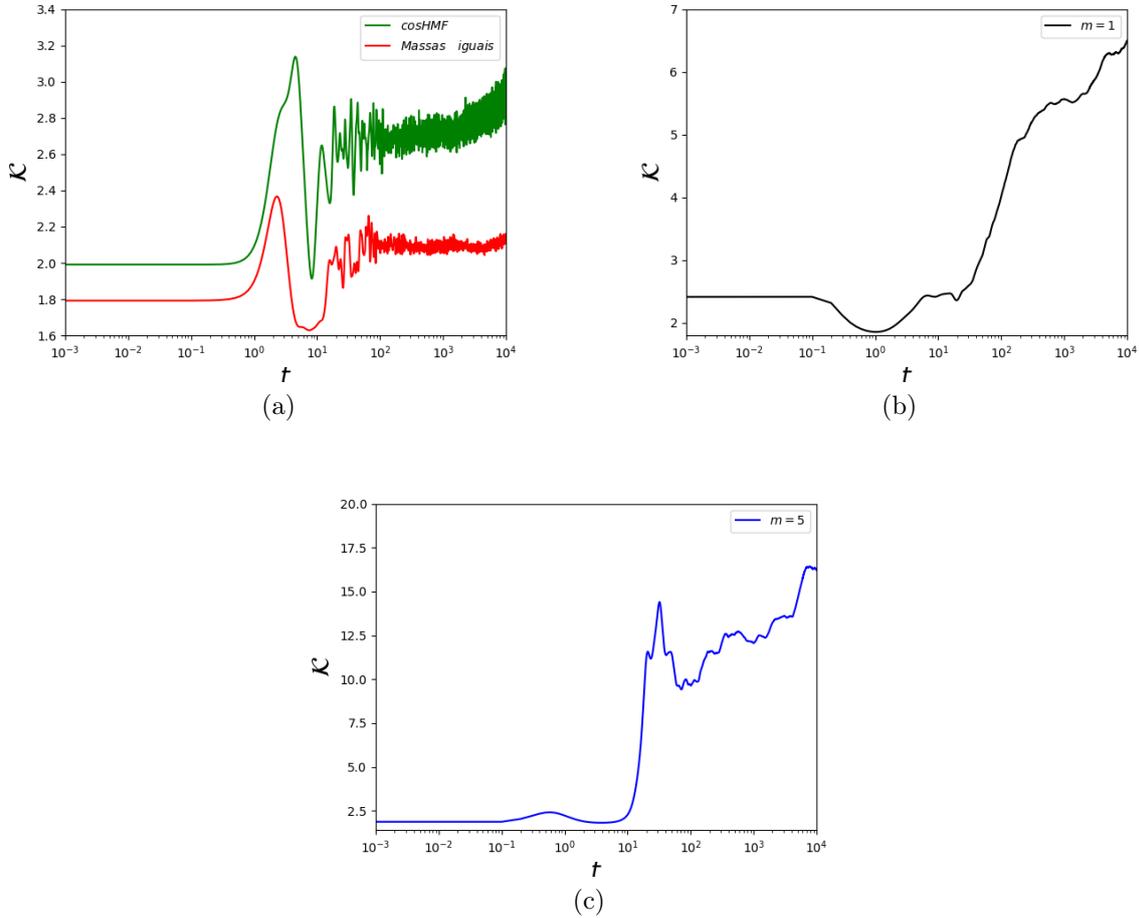


Figura 5.15: Representação da curtoses pelo tempo para o sistema cosHMF. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para  $N = 3000$  partículas sendo 30 com massa  $m = 5$ . Energia do sistema  $U = 1.5$  e tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ .

Como vimos, os resultados referentes ao sistema colisional e cosHMF se alteram quando considerado 10% de partículas pesadas, apresentando distribuições diferentes de sistemas menos massivos, portanto, esse efeito persistirá no sistema cosHMF colisional? A resposta é sim, na figura 5.16a vemos claramente uma alteração na distribuição de velocidades pelo valor da curtoses, que para este caso termina na região de 7, ou seja, o acréscimo de partículas mais massivas é considerável nos três sistemas analisados.

Os resultados correspondentes aos subconjuntos de partículas leves e pesadas são apresentados nas figuras 5.16b e 5.16c. Ambos os gráficos se diferem, se comportando de maneiras distintas quando comparados com as figuras 5.10b e 5.10c. Destarte, podemos concluir que os subsistemas quando analisados separadamente não se assemelham com os resultados dos subconjuntos para os

sistemas colisional e cosHMF, ou seja, em nível de subconjunto de partículas o sistema cosHMF colisional também se difere dos demais.

Desta forma, concluímos que o efeito de massa exerce influência sobre os sistemas analisados. Obtemos nas figuras 5.14, 5.15 e 5.16 três distribuições diferentes, quando comparadas aos sistemas menos massivo. Também é possível inferir que o comportamento do sistema cosHMF colisional é dependente dos efeitos de curto e longo alcance. Isso é claramente percebido no resultado apresentado na figura 5.16a, que assemelha seguir as mudanças sofridas pelos sistemas colisional e cosHMF, figuras 5.14a e 5.15a, porém, não sabemos ainda o quanto cada sistema influencia na distribuição final de velocidades do sistema cosHMF colisional, apesar das mudanças do sistema colisional serão mais significativas.

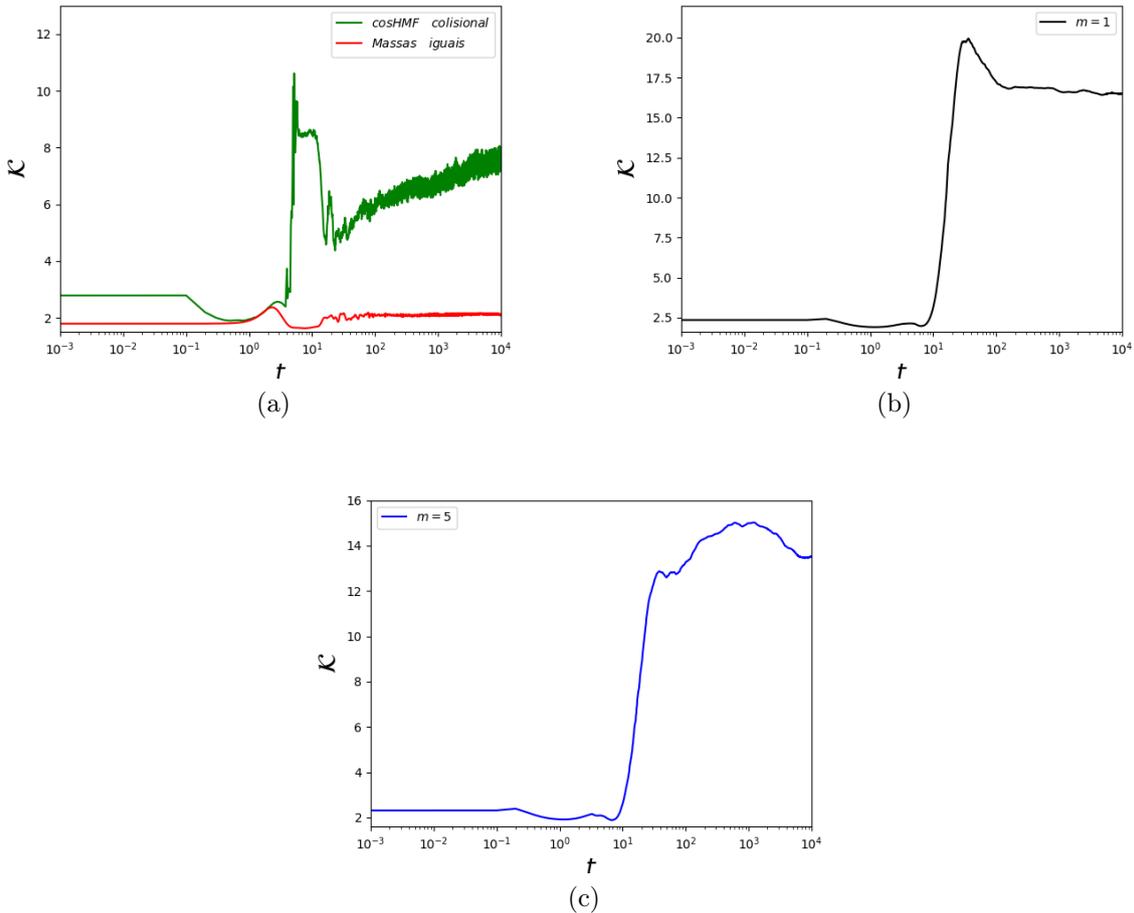


Figura 5.16: Representação da curtoses pelo tempo para o sistema cosHMF colisional. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para  $N = 3000$  partículas sendo 300 com massa  $m = 5$ . Energia do sistema  $U = 0.69$  e tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ .

Portanto, é interessante analisar se o acréscimo de partículas mais pesadas também altera sistema mais energético e desta forma, constatar se o efeito de massas é independente do nível de energia escolhido. Até os resultados anteriores para sistemas com energia  $U = 1.5$  não constatamos mudanças quando acrescentado o número de partículas mais massivas, passaremos ao próximo nível de energia na tentativa de observar efeitos semelhantes ao sistema de energia  $U = 0.69$ .

- $U = 1.5$

Começamos a análise do sistema mais energético  $U = 1.5$  pelo sistema colisional, figura 5.17.

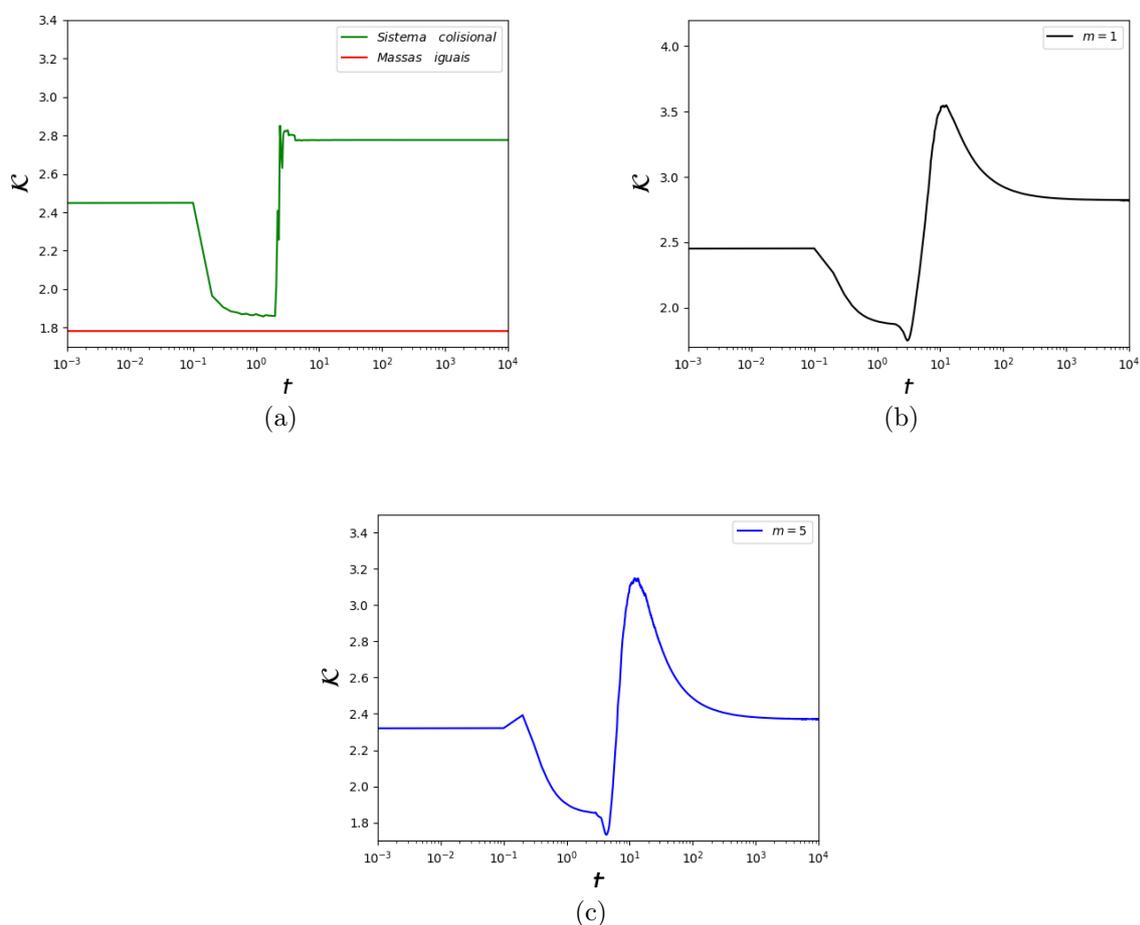


Figura 5.17: Representação da curtoses pelo tempo para o sistema colisional. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para  $N = 3000$  partículas sendo 300 com massa  $m = 5$ . Energia do sistema  $U = 1.5$  e tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ .

No sistema colisional com 10% de partículas pesadas, para configuração de energia  $U = 1.5$  o resultado se mostra diferente dos resultados procedentes, figuras 5.7a e 5.11a. No presente resultado, figura 5.17a, observamos curtoses com valor próximo de 2.7. Desta forma, podemos constatar que o acréscimo de partículas mais massivas têm influência importante em um sistema colisional unidimensional, sendo constatado para dois valores diferentes de energia. O comportamento dos subconjuntos de partículas, figuras 5.17b e 5.17c se mostram parecidos, de forma que podemos enxergar cada subconjunto como sistemas distintos de um sistema colisional de uma dimensão.

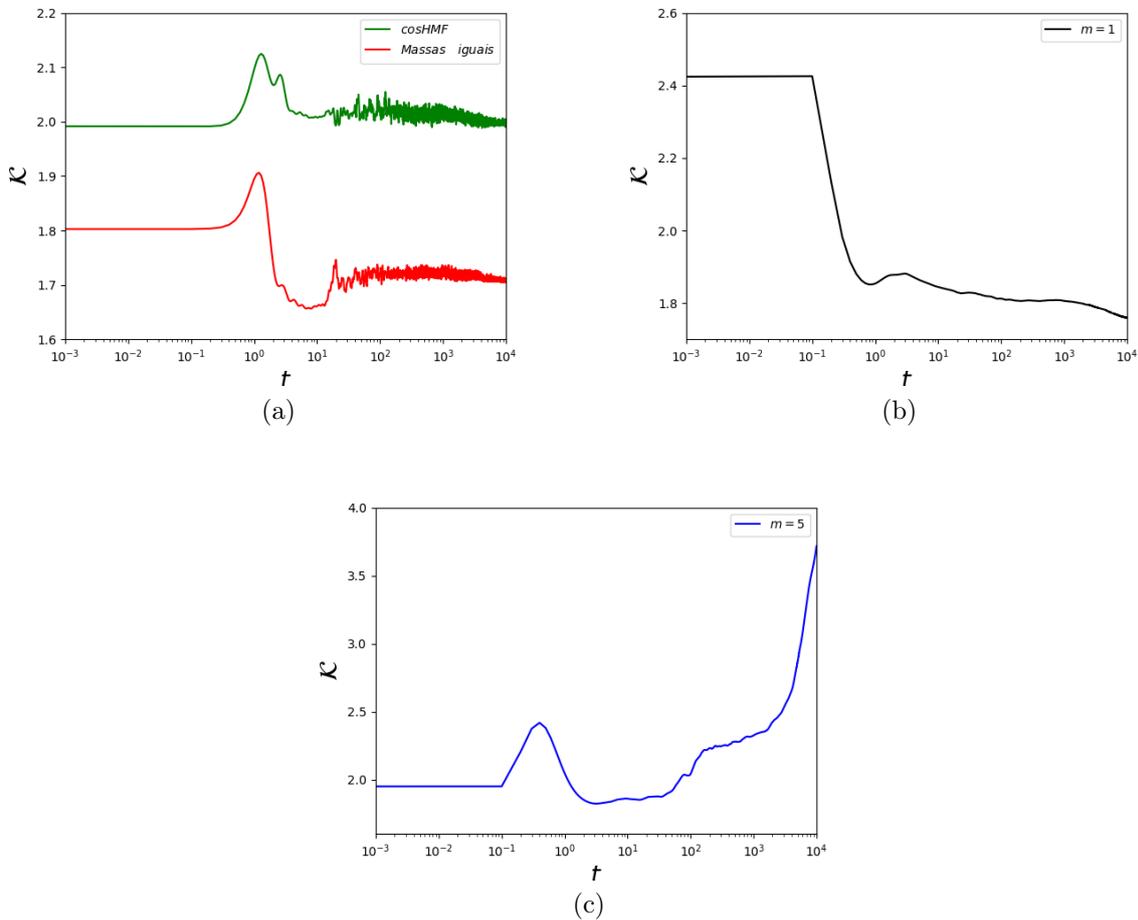


Figura 5.18: Representação da curtoses pelo tempo para o sistema cosHMF. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para  $N = 3000$  partículas sendo 30 com massa  $m = 5$ . Energia do sistema  $U = 1.5$  e tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ .

O sistema cosHMF representado pela figura 5.18a também se mostra diferente dos resultados

anteriores para configuração de mesma energia e menos massivos. Aqui obtemos curtoses de valor próximo de 2 e anteriormente obtemos resultados com curtoses próxima de 1.7, isso mostra claramente que o fato de acrescentar partículas mais pesadas altera a distribuição de velocidades do sistema tipicamente de longo alcance. Quando analisamos os subconjuntos de partículas leves e pesadas, figuras 5.18b e 5.18c, observamos novamente comportamentos característicos de dois SLA distintos, devido à diferença de quantidade de partículas, como já havíamos constatado.

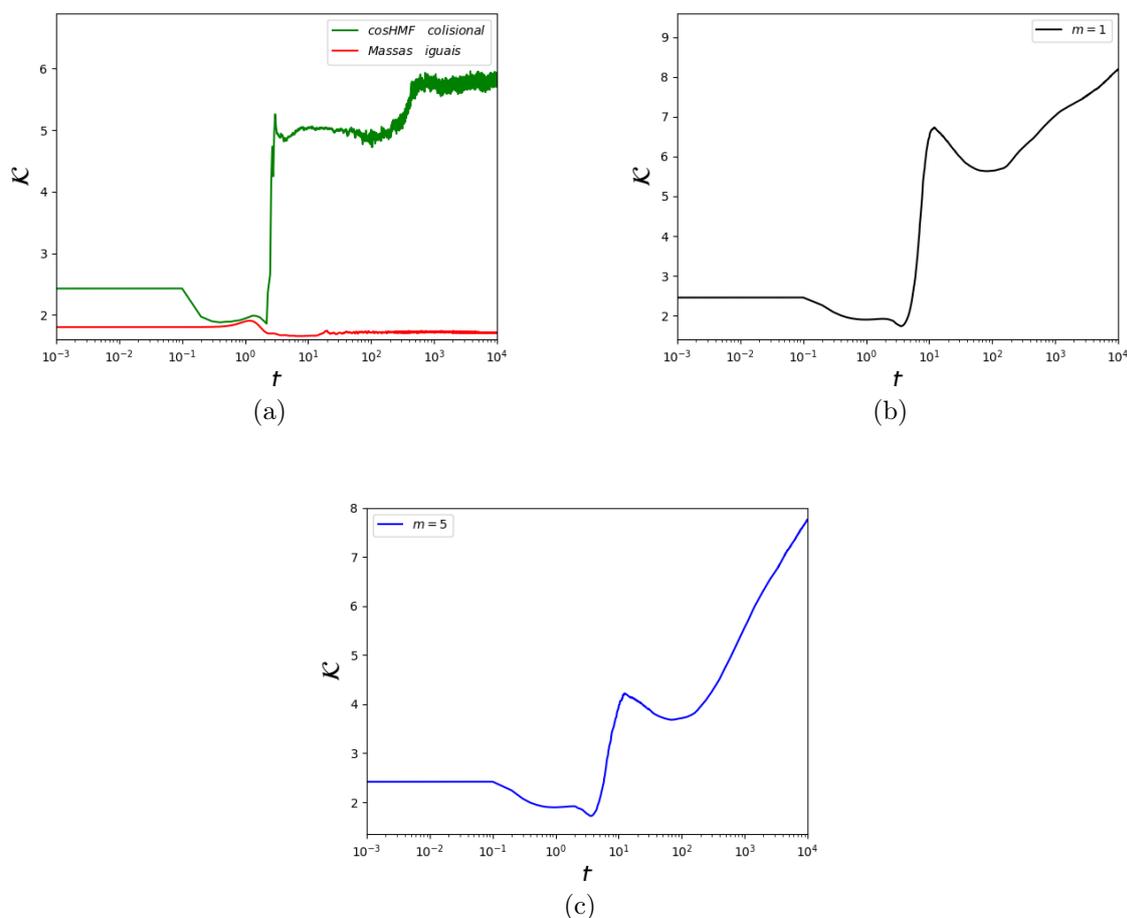


Figura 5.19: Representação da curtoses pelo tempo para o sistema cosHMF colisional. (a) conjunto de partículas, (b) subconjunto de partículas leves e (c) subconjunto de partículas pesadas. Simulação realizada para  $N = 3000$  partículas sendo 300 com massa  $m = 5$ . Energia do sistema  $U = 1.5$  e tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ .

A última análise para sistema composto por 10% de partículas pesadas é apresentada na figura 5.19a. Novamente o resultado se mostra diferente dos resultados anteriores, com valor de curtoses próximo de 5.5. Portanto, vemos perfeitamente que a distribuição de velocidades

do sistema cosHMF colisional segue as mudanças dos sistemas colisional e cosHMF. Em ambos os sistemas as mudanças de curtoses são significativas, o que torna mais conclusiva a ideia que a distribuição deste sistema misto terá contribuições diretas dos dois sistemas, curto e longo alcance. Porém, o sistema cosHMF colisional até o presente momento apresenta características típicas de longo alcance, apesar do efeito colisional.

Os subconjuntos de partículas, figuras 5.19b e 5.19c se comportam de maneiras distintas dos resultados apresentados pelas figuras 5.13b e 5.12c. No primeiro caso apresentado, para configuração de 1% os resultados dos subconjuntos de partículas do sistema cosHMF colisional se mostraram iguais aos do sistema colisional. Aqui, os resultados se diferem, tendo cada subconjunto comportamentos diferentes dos outros subconjuntos configurados para sistema de 10% de partículas pesadas.

### Sistemas com 25% de partículas com massa $m = 5$

Observamos pelas comparações apresentadas que o efeito de acrescentar partículas mais massivas aos sistemas altera as suas distribuições de velocidades. Desta forma, analisaremos sistemas mais massivo com 25% de partículas pesadas na tentativa de constatar as mesmas observações.

- $U = 0.69$

Nesta análise de sistemas com 25% de partículas pesadas, apresentaremos na figura 5.20 os resultados referentes aos sistemas colisional, cosHMF e cosHMF colisional.

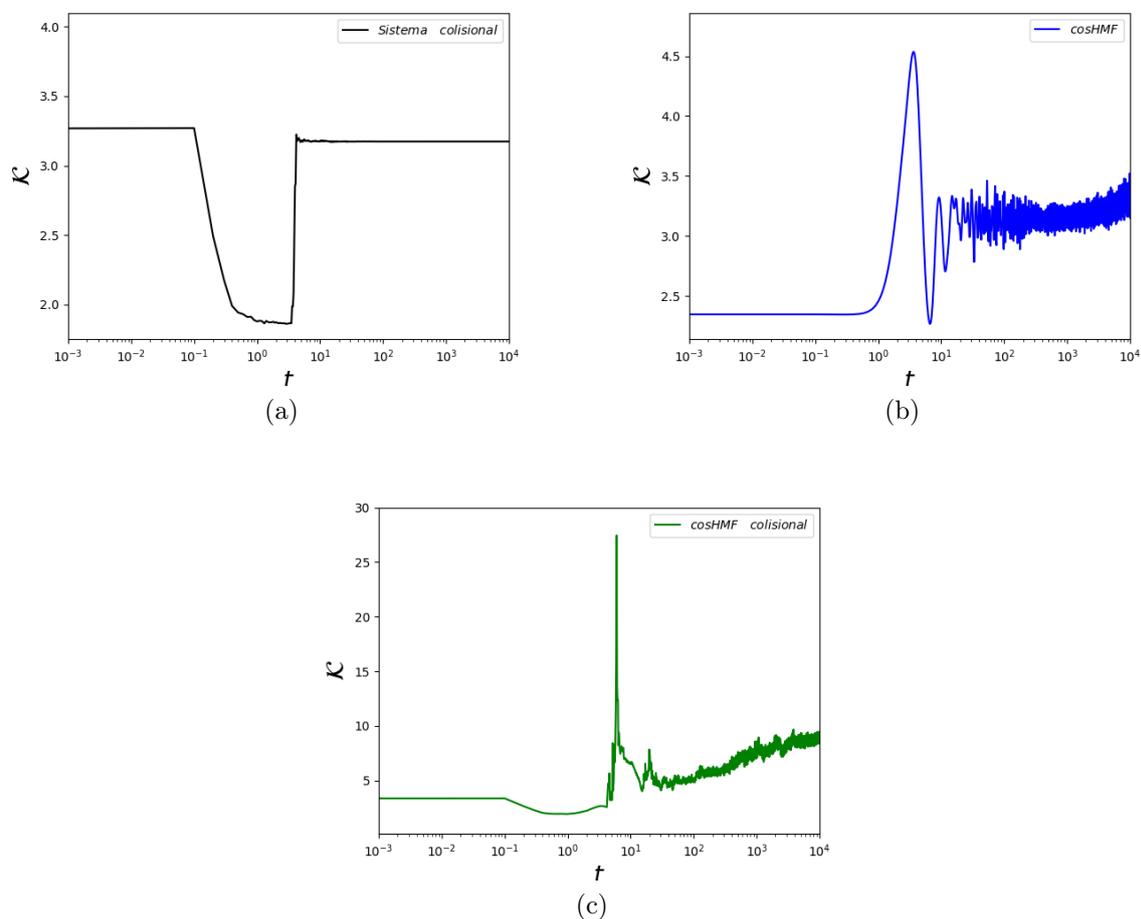


Figura 5.20: Curtoses pelo tempo aos sistemas (a) colisional, (b) cosHMF e (c) cosHMF colisional. Energia  $U = 0.69$ ,  $N = 3000$ , sendo 750 partículas de massa  $m = 5$ . Tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ .

O resultado para o sistema colisional, figura 5.21a, não mostra diferença em relação ao resultado do sistema menos massivo, apresentado na figura 5.17a. O que nos induz a concluir

que o sistema colisional unidimensional tem mesma distribuição de velocidades no regime entre 10% e 25% de partículas mais massivas para este nível de energia. O resultado para o sistema cosHMF apresenta diferença em relação ao resultado anterior, figura 5.18a. Observamos na figura 5.21b valor de curtoses na região de 3.2 no caso precedente 2.8, evidenciando que o efeito de massas altera a distribuição do sistema de longo alcance.

Referente ao sistema cosHMF colisional apresentamos o resultado na figura 5.21c. Aqui também se nota diferença com o resultado anterior, figura 5.19a. Observamos que o sistema configurado para 25% de partículas mais pesadas têm curtoses com valor na região de 8, na análise anterior com sistema menos massivo, curtoses de valor 7. Atribuímos essa leve mudança de curtoses do sistema cosHMF colisional a leve alteração sofrida pelo sistema cosHMF. O que confirma novamente que o sistema aqui proposto tem sua distribuição de velocidades dependente dos dois tipos de interação, curto e longo alcance. Portanto, passaremos para análise de sistemas mais energético  $U = 1.5$

- **U = 1.5**

Apresentamos os resultados do sistema mais energético  $U = 1.5$  e 25% de partículas pesadas na figura 5.21.

O resultado para o sistema colisional mais energético é visto na figura 5.21a, sendo diferente do resultado anterior com mesma energia, porém menos massivo, figura 5.17a. Portanto, constatamos que o efeito de massa é variável com o nível de energia e a quantidade de partículas mais massivas. Aqui observamos mudança significativa em relação ao resultado anterior, onde obtemos curtoses final com valor de 3.5. O sistema cosHMF também apresenta resultado diferente, visto na figura 5.21b. Observamos curtoses de valor 2.6 que apresenta acréscimo em relação ao resultado anterior, nos afirmando que o efeito de massa também é presente no sistema de longo alcance a partir de determinados níveis de energia.

Visto as mudanças dos resultados anteriores figuras 5.21a e 5.21b, o sistema cosHMF colisional também apresenta mudança de distribuição de velocidades para a configuração de 25% de partículas pesadas. Na figura 5.21c observamos um comportamento estranho com distribuição variando bruscamente no período da dinâmica. Desta foram, observamos mais uma vez que a distribuição do sistema proposto segue as mesmas mudanças que os sistemas colisional e cosHMF. Entre tanto, não sabemos ainda afirma em que nível cada tipo de potencial contribui, pois estamos limitados a apenas acompanhar as mudanças dos sistemas simples e inferir que a mudança do sistema misto está diretamente correlacionada.

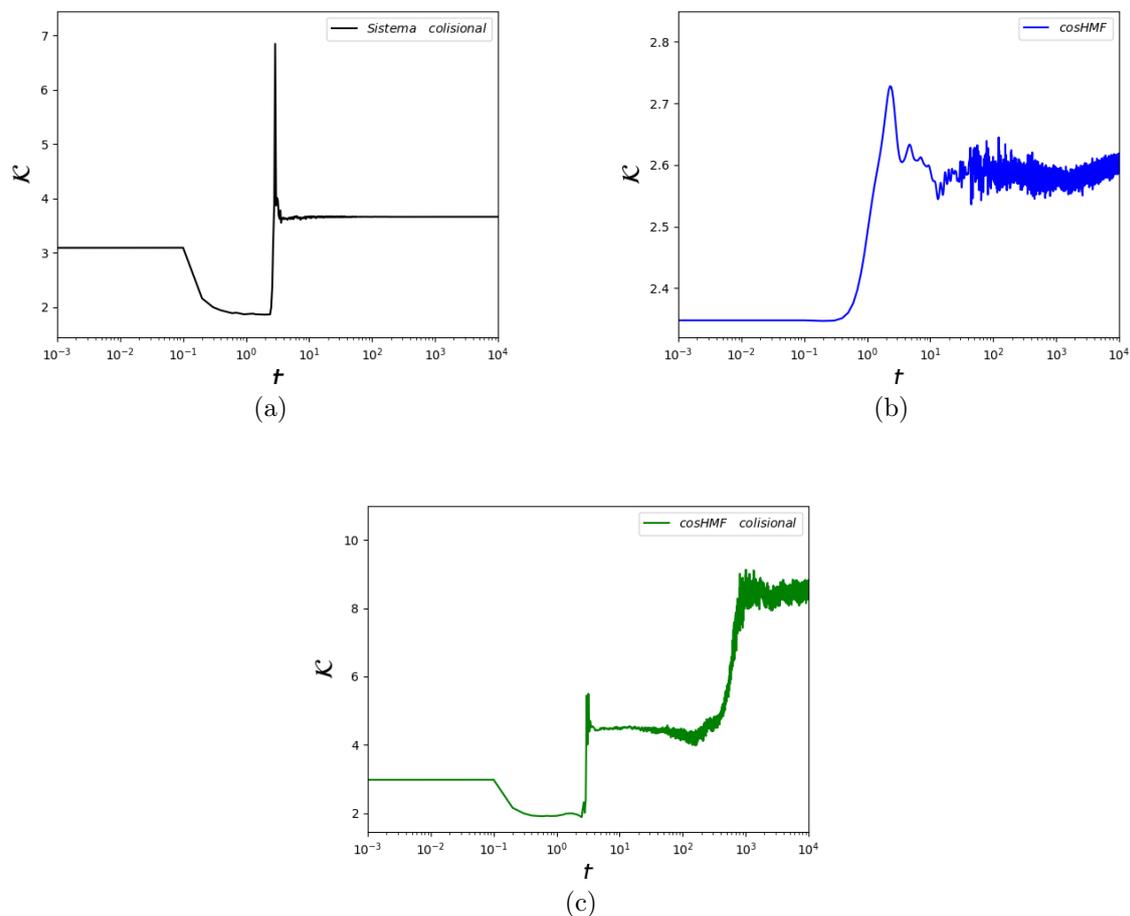


Figura 5.21: Curtoses pelo tempo aos sistemas (a) colisional, (b) cosHMF e (c) cosHMF colisional. Energia  $U = 1.5$ ,  $N = 3000$ , sendo 750 partículas de massa  $m = 5$ . Tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ .

Desta forma, para terminar a análise do efeito de massas nos sistemas analisados, apresentaremos a seguir o caso mais homogêneo possível. Analisaremos sistema com 50% de partículas leves e pesadas.

### Sistemas com 50% de partículas com massa $m = 5$

A última série de análise que apresentaremos será ao sistema homogêneo com 50% de partículas leves e pesadas, com o intuito de continuar a analisar como o acréscimo de partículas pesadas muda a distribuição de velocidades dos sistemas analisados.

- $U = 0.69$

Apresentamos os resultados para sistemas com energia  $U = 0.69$  na figura 5.22.

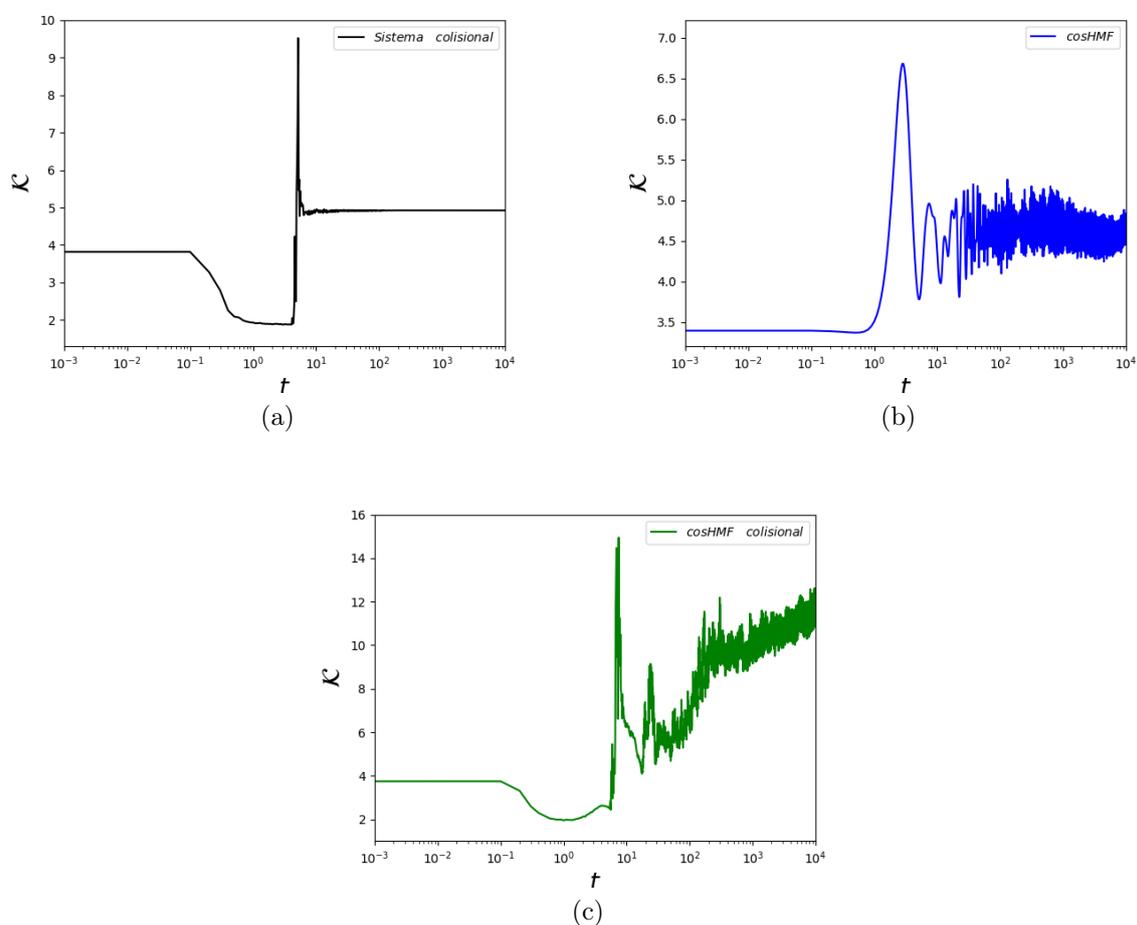


Figura 5.22: Curtoses pelo tempo aos sistemas (a) colisional, (b) cosHMF e (c) cosHMF colisional. Energia  $U = 0.69$ ,  $N = 3000$ , sendo 1500 partículas de massa  $m = 5$ . Tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ .

Os resultados apresentados na figura 5.22 mais uma vez mostram que o acréscimo de partículas pesadas altera a distribuição de velocidades dos sistemas em análise. Referente ao sistema

colisional, figura 5.22a, vemos o aumento do valor de curtoses quando comparado ao sistema anterior para o mesmo nível de energia, porém menos massivo, figura 5.20a. A mesma observação é válida para o sistema cosHMF que apresenta na figura 5.22b valor de curtoses na região de 4.5, sendo diferente do valor obtido na análise precedente.

Com respeito ao sistema por nós proposto, o resultado segue o mesmo comportamento dos resultados anteriores. Observamos na figura 5.22c valor de curtoses na região de 10. Na análise precedente, figura 5.20c, obtemos valor de curtoses na região de 8. Portanto, podemos afirmar que a diferença de comportamento do sistema cosHMF colisional segue as mudanças de comportamento dos sistemas colisional e cosHMF, pois é visto que quando há mudança em qualquer dos sistemas, observaremos mudanças no sistema misto. Porém, não sabemos como medir a influência de cada um dos sistemas, colisional e cosHMF.

- **$U = 1.5$**

A última análise que apresentaremos será para sistema com energia  $U = 1.5$  e 50% de partículas pesadas, figura 5.23.

Na última análise apresentada, figura 5.23, constatamos os mesmos efeitos observados a partir da escolha de sistema com 10% de partículas pesadas. Mais uma vez observamos o efeito de massa, que quando acrescido a quantidade de partículas massivas, altera as distribuições de velocidades dos sistemas em questão. Também é conclusivo que o comportamento do sistema cosHMF colisional tem dependência com os dois tipos de interações presentes, curto e longo alcance, pois observamos que alterações em um dos sistemas se reflete no sistema aqui proposto.

Desta forma, encerramos a análise proposta para a termalização, a comparação de resultados entre um sistema tipicamente de longo alcance com um sistema misto acrescido de efeitos colisionais, proposto e desenvolvido por nós. O que caracteriza tal trabalho como autêntico e original. Passaremos agora à análise estatística de uma partícula teste.

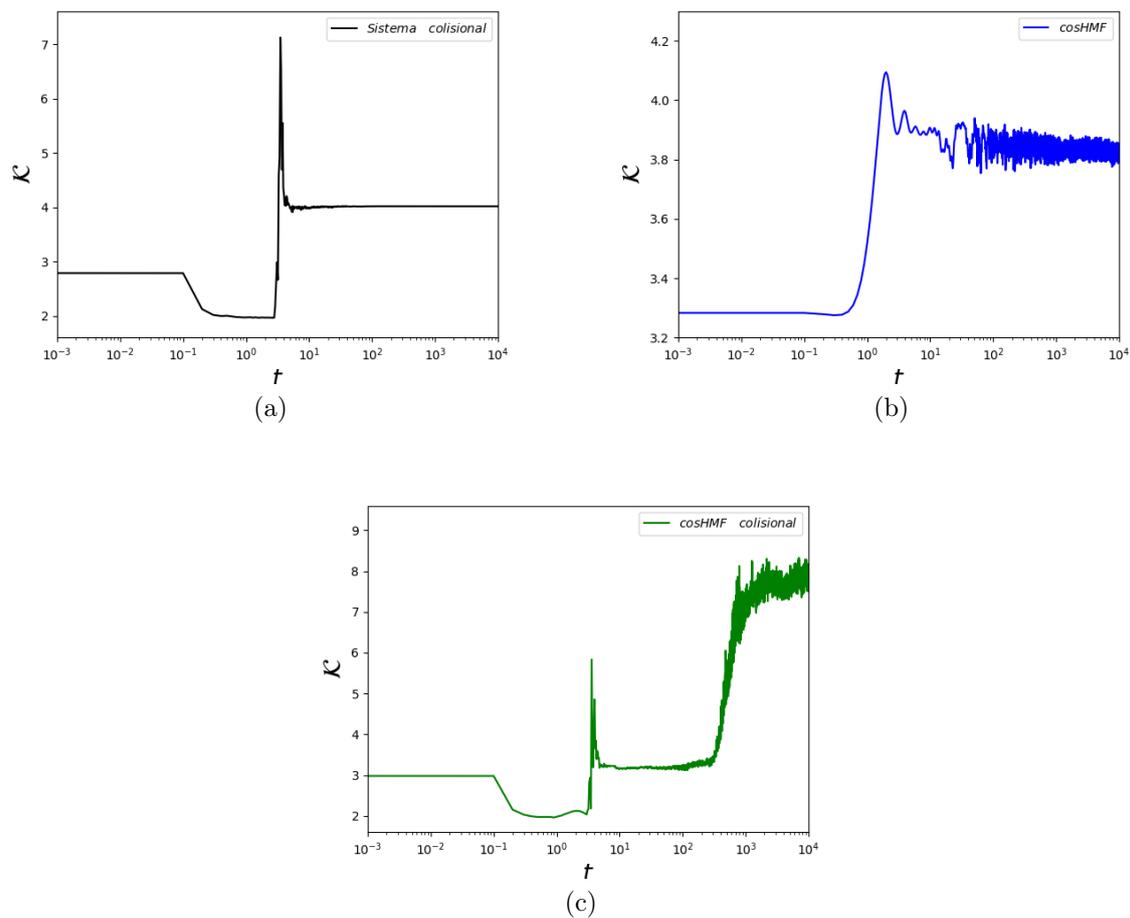


Figura 5.23: Curtoses pelo tempo aos sistemas (a) colisional, (b) cosHMF e (c) cosHMF colisional. Energia  $U = 1.5$ ,  $N = 3000$ , sendo 1500 partículas de massa  $m = 5$ . Tempo total de simulação  $t = 1 \times 10^4$ .

## 5.2 Medidas sobre uma partícula teste

Nesta parte do trabalho encerraremos a análise da termalização, porém, analisaremos a medida da curtoses sobre única partícula teste. Desta forma, apresentaremos resultados referentes a duas espécies de partícula teste, ou seja, partícula com massa  $m = 1$  e  $m = 5$ , para ambos os sistemas estudados até aqui.

A comparação do resultado oriundo de uma partícula teste com o resultado do conjunto de partículas é muito importante, pois nos permite analisar se a média do conjunto de partículas irá se refletir sobre a média de uma única partícula, caso isso seja verificado, confirmamos a ergodicidade do sistema em análise. Para realizar medidas sobre uma partícula teste é necessário uma estatística de ensemble, isto é, realizar várias medidas com sementes de geradores aleatórios diferentes. A quantidade de repetições garantirá uma melhor estatística sobre a partícula teste, pois a medida sobre uma partícula teste consiste na média de todas as curtoses medidas.

Nesta análise no restringiremos a sistemas com único valor de energia  $U = 0.69$ , pois os efeitos percebido pelo sistema mais energético  $U = 1.5$  são os mesmos.

- **U = 0.69**

Os resultados referentes aos três sistemas analisados são apresentados na figura 5.24. Começamos nossa análise com o sistema colisional. Na figura 5.24a temos a curtoses de uma partícula teste com massa  $m = 1$ , o resultado se mostra bastante interessante, pois mesmo a nível individual, a partícula não alcança o equilíbrio termodinâmico, apresentando pouca variação e um baixo valor de curtoses. Já o resultado para partícula teste mais massiva é visto na figura 5.24b, com distribuição de velocidades constante. O resultado para partícula mais massiva é bastante compreensível, uma vez que a cada colisão tal partícula não varia consideravelmente sua velocidade por ser mais massiva. Outro fato importante é a diferença dos resultados das partículas teste em relação ao conjunto de partículas, que são resultados diferentes entre si, mostrando que o sistema colisional unidimensional não tem ergodicidade e termalização.

Os resultados às partículas testes do sistema cosHMF são apresentados pelas figuras 5.24c e 5.24f. A partícula teste menos massiva apresenta grande variação em sua curtoses, seguindo o comportamento dos SLA, variando de forma violenta no início do processo dinâmico e depois tendo a se estabilizar nos EQE, figura 5.24c. Já o resultado para partícula mais massiva apresenta curtoses de baixo valor, mas seguindo o comportamento da partícula menos massiva, forte

variação no início do processo dinâmico com a tendência de se estabilizar, figura 5.24d. Ambos os resultados confirmam a não-ergodicidade já prevista aos SLA.

A última análise que apresentamos é para o sistema cosHMF colisional nas figuras 5.24e e 5.24f. No que concerne a partícula menos massiva  $m = 1$ , figura 5.24e, o resultado da curtoses se mostra constante, nos sugerindo que tal partícula tem comportamento de um sistema puramente colisional sem massas diferentes. Porém, não medimos se tal partícula sofreu colisão de outra partícula mais massiva, fato que pode influenciar neste resultado. Já o resultado à partícula mais massiva, figura 5.24f, mostra um comportamento diferente, com curtoses sofrendo variações abruptas no início da dinâmica e depois se estabilizando. Assim, percebemos também a não-ergodicidade do sistema cosHMF colisional.

Aqui acabamos as análises propostas para esta tese, onde apresentamos resultados originais.

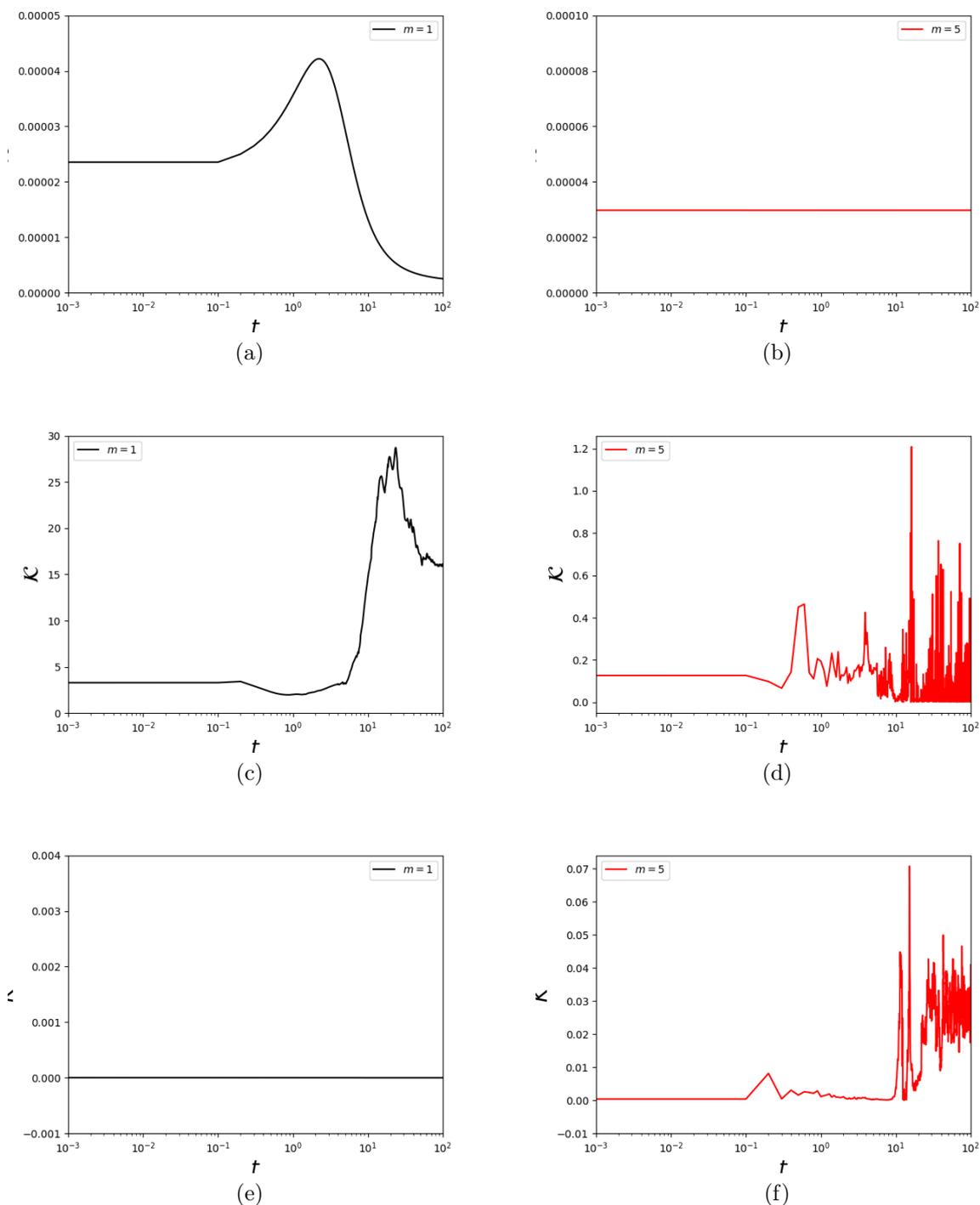


Figura 5.24: Representação da curtoses de uma partícula teste. Em preto partículas de massa  $m = 1$  em vermelho  $m = 5$ . (a) e (b) sistema colisional. (c) e (d) sistema cosHMF. (e) (f) sistema cosHMF colisional. Simulação realizada com 500 repetições, com  $N = 3000$ , tempo de simulação  $t = 1 \times 10^2$ .

# Capítulo 6

## Conclusões e perspectivas

### 6.1 Conclusões

O objetivo principal deste trabalho foi a análise de um sistema misto, composto por interação de curto e longo alcance. Para tanto, propomos ao modelo cosHMF efeitos colisionais. Tal sistema foi proposto com o objetivo de analisar as propriedades estatísticas e termodinâmicas, pois se conhece que SCA e SLA se diferem, desta forma, um sistema com ambas as interações apresentará quais propriedades? Por se tratar de um campo médio, o sistema cosHMF dificulta o cálculo do tempo de colisão entre partículas, sendo assim, propomos e testamos um novo método numérico como mecanismo de solução ao novo sistema proposto, o sistema cosHMF colisional. À vista disso, o primeiro grande resultado deste trabalho é o método proposto no capítulo 4 com algoritmo apresentado no apêndice A.3.

Referente a análise física, podemos concluir por intermédio da análise do espaço cinético o efeito de colisão no sistema cosHMF. Como vemos nas figuras 5.1, ?? e 5.2 o espaço cinético do sistema cosHMF se difere do sistema cosHMF colisional, como observamos há uma mudança na região de aglomeração, ficando conhecido que devido a efeitos de colisões o sistema cosHMF colisional é mais aglomerativo. Este resultado é confirmado pela análise da figura 5.3 que mede o vetor magnetização para os dois sistemas em análise, mostrando que o sistema cosHMF colisional tem maior valor de magnetização.

Com respeito a análise da termalização os resultados apresentados nesta tese são interessantes. O grande objetivo deste trabalho era saber se efeitos colisionais termalizariam um sistema tipicamente de longo alcance. Por se tratar de um sistema unidimensional, foi necessária a in-

serção de partículas com massas diferentes, pois sistemas colisionais unidimensionais não são termalizáveis. Desta forma, podemos concluir que o efeito de colisão altera um sistema unidimensional tipicamente de longo alcance desde que seja inserida única partícula com massa diferente.

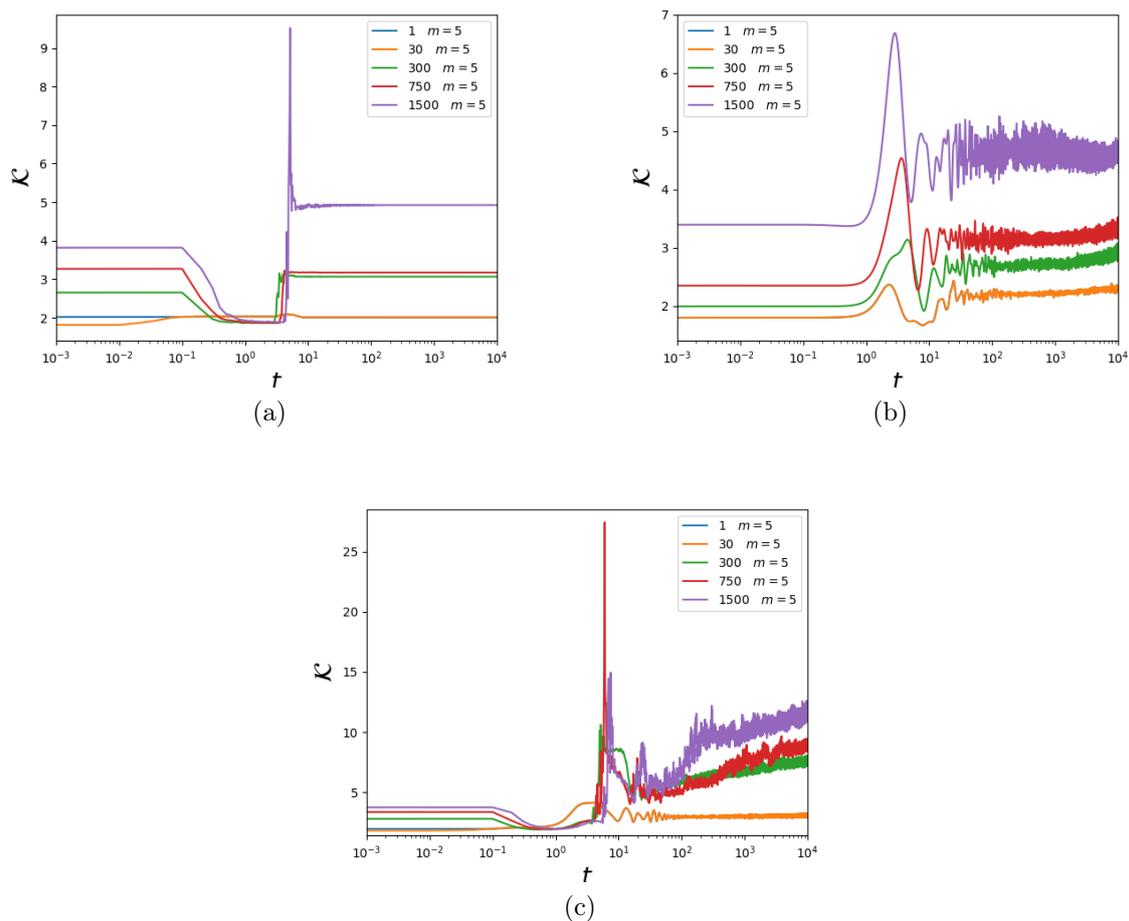


Figura 6.1: Comparação dos resultados obtidos. (a) sistema colisional. (b) sistema cosHMF. (c) sistema cosHMF colisional. Simulação realizada com  $N = 3000$ , tempo de simulação  $t = 1 \times 10^2$  e energia  $U = 0.69$

Porém, o mais interessante é a análise do efeito causado pela alteração da quantidade de partículas mais massivas. Como visto na figura 5.4b o sistema cosHMF colisional não se difere do sistema cosHMF quando o sistema tem massas iguais. Mas de outro lado descobrimos que o acréscimo de massas altera a distribuição do sistema cosHMF colisional. Na figura 6.1 acompanhamos os resultados apresentados nesta tese. Podemos concluir que a distribuição do sistema proposto será diferente do caso cosHMF, mas não sabemos dizer em que medida o potencial de

curto e longo alcance influenciará na distribuição de velocidades do sistema cosHMF colisional.

Desta forma, quando perguntamos: qual potencial prevaleceria sobre o outro? A resposta é nenhum, pois os resultados apresentados indicam que o sistema cosHMF colisional tem influência dos dois tipos de potenciais, curto e longo alcance. Do ponto de vista da termalização, o sistema cosHMF não é termodinâmico, apresentando o período de *relaxação violenta* até alcançar os estados quase estacionários, ou seja, segue as características dos SLA. As médias sobre as posições fornecem outras respostas que nos possibilita comparar os dois modelos e serão feitas em trabalhos posteriores.

As medidas realizadas sobre a partícula teste mostram que nenhuma das partículas testes apresentam as mesmas médias que os conjuntos de partículas. À vista disso, concluímos que o sistema cosHMF colisional é não-ergódico.

## 6.2 Perspectivas

Uma análise importante a ser feita é a consideração de um tempo maior de simulação, pois sabemos que para tempos muito longos o sistema cosHMF tende a termalizar, em nossas análises consideramos simulações com tempo de  $t = 1 \times 10^4$ . Outro ponto importante também é considerar sistemas com maior número de partículas. Outro ponto interessante a ser feito é a otimização do método proposto.

Outras questões ainda estão em aberto ao sistema cosHMF unidimensional, como a análise da distribuição das posições. Desta forma, o estudo do processo de difusão se faz bastante interessante, pois SLA apresentam processos de difusão anômala enquanto SCA não. Outras análises interessantes são propriedades termodinâmicas como a análise do parâmetro de ordem magnetização em função da energia e também a análise da temperatura em função da energia. O processo de produção de entropia também é um próximo passo a seguir.

O fato de escolher um sistema unidimensional aporta algumas dificuldades quando o desejo é analisar a termalização de um sistema colisional. Portanto, uma análise em mais dimensões se faz importante, pois o sistema colisional bidimensional após um período será termalizado, independente do valor das massas de cada partícula. Desta forma, implementaremos o sistema em duas dimensões, esperando sistemas colisionais termalizados e desta maneira, avaliar as mudanças do sistema cosHMF colisional pelo número de partículas, não mais pela mudança da quantidade de partículas com massas diferentes. Tal sistema com mais dimensões se aproxima de sistemas

de galáxias que entram em colisão.

Uma análise matemática também é cabível. Como também implementar a este método o modelo do Ring Model.

Desta forma encerramos esta tese com boa interpretação acerca dos efeitos colisionais em um sistema tipicamente de longo alcance, mas deixando outras questões em aberto por ser um sistema muito curioso e rico.

# Apêndice A

## Métodos numéricos e códigos

Neste apêndice apresentaremos toda a estruturação numérica apresentada no decorrer deste trabalho, que tem como proposta a implementação de um *novo método numérico*, que possibilita o cálculo de colisões para o sistema cosHMF. Ademais, é por intermédio de ensaios numéricos que realizamos a análise estatística do sistema físico proposto. Todos os códigos apresentados são escritos e compilados para a linguagem de programação *C*.

### A.1 Modelo de Folhas

Um ponto interessante do modelo de folhas carregadas se dá pela estruturação do campo Coulombiano. Como é descrito no capítulo 3.1, no decorrer da dinâmica cada partícula pode encontrar uma partícula vizinha à direita ou à esquerda. Desta maneira, a cada encontro consideraremos um evento de colisão. Portanto, a cada passo no tempo o ordenamento das partículas será o mesmo do início fazendo com que o campo de cada partícula se mantenha constante, isso nos permite derivar a equação (3.12) que calcula os tempos de espera  $t_{i,j}$  para cada evento, desta maneira, podemos dirigir toda a dinâmica de acordo com esse tempo de colisão.

O método mais comum para a dinâmica de colisões é o *event driven* (*método dirigido por eventos*), já citado neste trabalho. O grande problema quando se utiliza o event driven reside fato que a cada evento o programa calcula os tempos de colisões entre pares, exigindo grande esforço computacional, sendo a parte mais demorada da simulação. À vista disso, alguns métodos numéricos foram criados na tentativa de otimização.

Um exemplo de um método otimizado pode ser encontrado na literatura física, sendo o traba-

lho proposto por Rouet e Feix [39]. Ao tratar o problema de folhas elétricas os autores apresentam um método alternativo ao cálculo dos tempos de colisão entre os pares, o método consiste basicamente em calcular apenas os próximos tempos de espera das partículas que colidiram na observação anterior, como explicaremos a seguir.

### A.1.1 Event driven otimizado

Como o modelo de folhas carregada (3.7) nos permite calcular de forma exata o tempo de um evento de colisão, estamos habilitados a acompanhar o movimento preciso de duas partículas, colisão após colisão, sendo essa uma das vantagens do modelo adotado. Portanto, quando realizamos a dinâmica molecular usando o método padrão consideramos uma colisão entre os pares  $i$  e  $j = i + 1$ , realizada a colisão, recalculamos todos os tempos de colisão  $t_{i,j}$ . No modelo de folhas analisamos a dinâmica em um círculo contendo partículas distribuídas aleatoriamente entre  $0 \leq x_i \leq L$  ou  $-L \leq x_i \leq 0$ , como visto na figura 3 [41]. Desta forma, uma vez que possamos ordenar as posições das partículas por intermédio de um método de indexação é possível mapear para uma dada partícula  $i$  as partículas vizinhas à esquerda ( $i - 1$ ) e à direita ( $i + 1$ ).

Para otimizar o método event driven é proposto o seguinte, em vez de recalculamos todos os tempos  $t_{i,j}$  de colisão entre pares, calcularemos apenas os próximos tempos de espera ao par que colidiu na observação anterior, ou seja,  $i$  e  $i + 1$ . Desta forma, calcularemos apenas o tempo de colisão entre os pares  $(i, i - 1)$ ,  $(i + 1, i + 2)$  e  $(i, i + 1)$ . Uma vez que estes tempos são calculados, eles são realocados no vetor designado aos tempos de colisão  $t_{i,j}$ , após a realocação é feito a triagem do menor tempo de colisão entre as partículas para que se possa dirigir o próximo evento. À vista disso, o novo método se faz mais eficiente, uma vez que agora a parte mais dispendiosa é a triagem do menor tempo de colisão, já que o cálculo de todos  $t_{i,j}$  é evitado. A figura A.1 ilustra o método implementado ao cálculo do tempo de colisão aos pares que colidem.

Resumimos o método event driven otimizado nos seguintes passos

1. Inicialização do sistema, onde distribuímos valores às posições, velocidades, massas e cargas. Também é realizado o cálculo do campo Coulombiano percebido por partícula.
2. Ordenamento de todas as partículas utilizando um método de indexação, sendo válido tanto às partículas reais como às partículas fantasmas.
3. Cálculo do tempo de colisão  $t_{i,j}$  entre todos os pares de partículas.

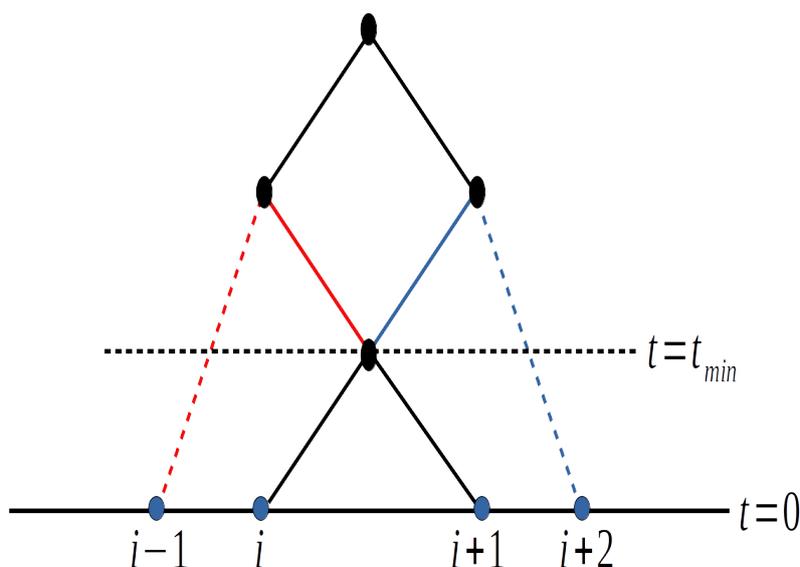


Figura A.1: Ilustração do cálculo entre do tempo de colisão entre partículas que colidem. Após primeira colisão calcularemos apenas os próximos tempo de colisão para as partículas à esquerda e direita de  $i$  e  $i + 1$ , respectivamente.

4. Em seguida, faz-se a triagem do menor tempo de espera para o próximo evento.
5. Conhecido o menor tempo de espera, evolui-se as posições e velocidades das partículas de acordo com o menor tempo encontrado.
6. Aplicação da dinâmica colisão ao par de partícula colidente.
7. Após a dinâmica de colisão entre o par  $(i, i + 1)$ , calcularemos o tempo para os pares  $(i, i - 1)$ ,  $(i + 1, i + 2)$  e  $(i, i + 1)$ . Uma vez encontrado o tempo, eles são realocados dentro do vetor designado aos tempos de espera.
8. Retorna-se ao passo número 4.

## A.1.2 Algoritmo e códigos implementados

### Algoritmo

No algoritmo 1 apresentamos o esquema geral do programa que utilizamos para calcular a dinâmica molecular ao modelo de folhas elétricas. Desta forma, iniciamos o programa com a distribuição inicial de posição e velocidade às partículas, em seguida ordenamos as posições das partículas pelo método de indexação, depois se calcula o campo elétrico e os tempos de colisão entre os pares. Em seguida utilizamos a função energia, que servirá de parâmetro de

verificação do programa, uma vez que o sistema é conservativo. Por fim, iniciamos as medidas físicas desejadas.

O laço principal do programa será realizado de acordo com o número de observação que desejamos fazer, sendo que cada observação terá um tempo de observação  $t_{obs}$  associado, sendo este, o passo numérico. À vista disso, o tempo total de simulação será dado por  $t = N_{obs} \times t_{obs}$ . Portanto, é no laço principal onde se calcula a dinâmica de colisão utilizando o método event driven otimizado, esta função será executada enquanto houver colisões durante uma observação delimitada por  $t_{obs}$ .

---

**Algoritmo 1:** Modelo de folhas
 

---

```

1 início
2 {
3   distribuição inicial();
4   campo elétrico();
5   indexação();
6   cálculo dos tempos de colisão  $t_{i,j}()$ ;
7   energia();
8   medidas();
9   para ( $i_{obs} = 0; i < N_{obs}; i++$ ) faça
10  {
11    enquanto ( $t < (i_{obs} + 1) * t_{obs}$ ) faça
12    {
13      dinâmica colisional();
14    }
15    energia();
16    medidas();
17  }
18  return 0;
19 }
```

---

## Códigos implementados

Ao modelo de folhas elétricas apresentaremos alguns códigos, como a função principal e as funções do cálculo do campo elétrico e da dinâmica colisional.

### Função principal do programa

```

1
2 #include <stdio.h>
3 #include <stdlib.h>
4 #include <math.h>
5 #include <time.h>
```

```

6
7 #include "ran2.c"
8
9 #include "initial_conditions.c"
10 #include "index.c"
11 #include "energyk.c"
12 #include "energyp.c"
13 #include "energy.c"
14 #include "field.c"
15 #include "coltime.c"
16 #include "dynamic1.c"
17 #include "progress_bar.c"
18
19 int main()
20 {
21
22
23     FILE *fin;
24     fin = fopen("input.dat", "r");
25
26     int i, j, k, sgn, it, itmax, A, B, count = 0, ic, iesc, kesc, kesc2, iobs, nob, nevent, ncol;
27     double h, L, dv, deltax, difx, difv, tl, tij, t, ts, tphys, E0, En, Ek0, Ek, Ep0, Ep, twait, tobs, energy_input
28     ;
29     unsigned long N, NN;
30     long int a, *seed=&a;
31
32     iesc = 0;
33     kesc = 0;
34     kesc2 = 0;
35     nevent = 0;
36     ncol = 0;
37     L = M_PI;
38     fscanf(fin, "%lu\n", &N);
39     NN = 2*N;
40     fscanf(fin, "%lf\n", &tl);
41     printf("\nN = %lu\n", N);
42     printf("\nEnter obs number:\n");
43     scanf("%d", &nobs);
44     printf("\nEnter obs time:\n");
45     scanf("%lf", &tobs);
46
47     double *x = (double*)malloc(NN*sizeof(double));
48     double *v = (double*)malloc(NN*sizeof(double));
49     double *m = (double*)malloc(NN*sizeof(double));
50     double *Np = (double*)malloc(NN*sizeof(double));
51     double *Nm = (double*)malloc(NN*sizeof(double));
52     double *E = (double*)malloc(NN*sizeof(double));
53     unsigned long *indx = (unsigned long*)malloc(NN*sizeof(unsigned long));
54     double *coltime = (double*)malloc(NN*sizeof(double));
55     int *partnr = (int*)malloc(NN*sizeof(int));
56
57     initial_conditions(N, x, v, m, L);
58
59     Ep = pe(N, x, L);
60     Ek = ke(N, v, m);
61     E0 = Ep + Ek;
62
63     printf("\n The initial value of energy %lf\n ", E0);
64
65     indexx(NN, x-1, indx-1);
66     for(i = 0; i < NN; i++)
67         indx[i] -= 1;

```

```

67
68     N = (int)N;
69
70     efield(N, Np, Nm, indx, x, L, E);
71
72     tphys = 0.0;
73     tij = 0.0;
74
75     mintime(N, coltime, partnr, L, x, v, m, indx, E);
76
77     for(iobs = 0; iobs < nob; iobs++)
78     {
79         progress_bar((double) iobs/nob);
80         twait = tobs;
81         while(tphys < (iobs+1)*tobs && twait > 0.0)
82         {
83             dynamic1(N, &tij, &tphys, &twait, tl, coltime, partnr, x, indx, v, m, L, Np, Nm, E, &kesc, &
84                 iesc, &fin);
85             kesc2 = kesc*kesc;
86             if(kesc == -1 || kesc == 1 || kesc == 0)
87             {
88                 nevent += 1;
89             }
90             if(kesc == 0)
91             {
92                 ncol += 1;
93             }
94             Ep = pe(N, x, L);
95             Ek = ke(N, v, m);
96             En = Ek + Ep;
97         }
98     }
99
100     Ep = pe(N, x, L);
101     Ek = ke(N, v, m);
102
103
104     En = Ep + Ek;
105
106     progress_bar(1.0);
107
108     printf("\n");
109     printf("\nThe final value of energy %lf\n", En);
110     printf("\nThe error is %lf\n:", (En-E0)/E0);
111     printf("\nThe physical time %lf\n", tphys);
112     printf("\nNumber of events %d\n", nevent);
113     printf("\nNumber of collisions %d\n", ncol);
114
115     return 0;
116 }

```

### Partículas fantasmas e campo elétrico

Um método importante que ajuda na obtenção é a implementação das partículas fantasmas, uma maneira de visualizar a contagem de partículas utilizando as partículas fantasmas é apresentada na figura A.2, com as partículas em azul representando as partículas reais e as vermelhas as partículas fantasmas.

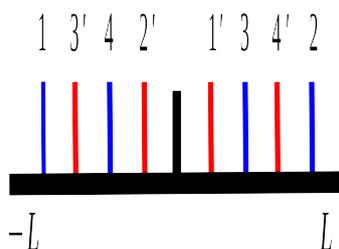


Figura A.2: Representação do sistema indo de  $-L$  até  $L$ , onde inserimos as partículas reais e seus fantasmas, em azul e vermelho, respectivamente.

Como observamos temos um sistema tem comprimento de  $2L$  que varia de  $-L$  até  $L$ , portanto se consideramos somente uma metade do sistema, as partículas se tornam indistinguíveis, portanto, o sistema real é considerado  $2L/2$ . Apresentamos o código implementado ao cálculo do campo elétrico  $E(x_i)$  utilizando as partículas fantasmas.

```

1 #include <stdio.h>
2 #include <stdlib.h>
3 #include <math.h>
4 #include <time.h>
5
6 void efield(unsigned long N, double Np[], double Nm[], unsigned long indx[], double x[], double L, double E[])
7 {
8     int i, j;
9     double A, B, deltax;
10    N = (int)N;
11
12    for(i = 0; i < N; i++)
13    {
14        Np[i] = 0.;
15        Nm[i] = 0.;
16        for(j = 0; j < N; j++)
17        {
18            deltax = x[i] - x[j];
19            A = floor(2.+(deltax)/L);
20            B = fmod(A, 2);
21            Np[i] += B;
22        }
23        Nm[i] = N - 1. - Np[i];
24        E[i] = (Np[i] - Nm[i]);
25        E[i+N] = E[i];
26    }
27 }
```

### Dinâmica colisional e otimização do método event driven

É nesta parte do programa que otimizamos o método event driven, apresentamos a função que realiza a dinâmica de colisão, ele inicializa fazendo a triagem do menor tempo de colisão entre as partículas. Depois é calculado o tempo em que uma partícula pode sair pela esquerda ou pela direita, caso esse tempo seja menor que de uma colisão, consideraremos isso como um evento. Uma vez conhecido o menor tempo de colisão entre os pares, evoluímos as posições de

todas partículas de acordo com esse tempo, até o que par colidente se encontre, após realizamos a dinâmica de colisão e então, o cálculo que otimiza o método event driven, como visto no código abaixo.

```

1  #include <stdio.h>
2  #include <stdlib.h>
3  #include <math.h>
4
5
6
7  void dynamic1(unsigned long N, double *tij, double *tphys, double *twait, double t1, double coltime[], int partnr[],
   double x[], unsigned long indx[], double v[], double m[], double L, double Np[], double Nm[], double E[], int *
   kesc, int *iesc, FILE **fin)
8  {
9      int i, icol, jcol, j, jj, k, fjcol, ficol, fiicol, ii, in, NN;
10     double difx, difxN, difx0, difx1, difx2, difvN, difvv, difv0, difv, difv1, difv2, difE, difEN, difE0, difE1,
        difE2, delN, del0, del1, del2, sqrN, sqr0, sqr1, sqr2, xesc, tesc, tout0, toutN, tij2, M, vcm, attendre;
11
12     N = (int)N;
13     N = 2*N;
14     *kesc = 2;
15     *tij = *twait;
16
17     for(k = 0; k < N; k++)
18     {
19         if(coltime[k] < *tij)
20         {
21             *tij = coltime[k];
22             icol = k;
23             *kesc = 0;
24         }
25     }
26
27     difxN = x[indx[N-1]];
28     difvN = v[indx[NN-1]];
29     difEN = E[indx[N-1]]/m[indx[N-1]];
30     delN = difvN*difvN - 2.*difEN*difxN;
31
32     if(delN > 0)
33     {
34         toutN = (-difvN + sqrt(delN))/(difEN);
35         if(toutN < *tij && toutN > 0)
36         {
37             *tij = toutN;
38             *kesc = 1;
39             *iesc = indx[NN-1];
40         }
41     }
42
43     difx0 = x[indx[N]];
44     difv0 = v[indx[0]];
45     difE0 = E[indx[N]]/m[indx[N]];
46     del0 = difv0*difv0 - 2.*difE0*difx0;
47
48     if(del0 > 0)
49     {
50         tout0 = (-difv0 - sqrt(del0))/(difE0);
51
52         if(tout0 < *tij && tout0 > 0)
53     {

```

```

54         *tij = tout0;
55         *kesc = -1;
56         *iesc = indx[0];
57     }
58 }
59
60 *tphys += *tij;
61 *twait -= *tij;
62
63 for(k = 0; k < NN; k++)
64 {
65     coltime[k] = coltime[k] - *tij;
66     x[indx[k]] = x[indx[k]] + v[indx[k]]*(*tij) + 0.5*E[indx[k]]*(*tij)*(*tij)/(m[indx[k]]);
67     v[indx[k]] += E[indx[k]]*(*tij)/(m[indx[k]]);
68 }
69
70 if(*kesc == 0)
71 {
72     jcol = icol + 1;
73     M = m[indx[icol]] + m[indx[jcol]];
74     vcm = (m[indx[icol]]*v[indx[icol]] + m[indx[jcol]]*v[indx[jcol]])/M;
75     difv = -(v[indx[icol]] - v[indx[jcol]]);
76     v[indx[icol]] = vcm + (m[indx[jcol]]/M)*difv;
77     v[indx[jcol]] = vcm - (m[indx[icol]]/M)*difv;
78     v[indx[icol+N]] = v[indx[icol]];
79     fjcol = fmod(jcol+N, NN);
80     v[indx[fjcol]] = v[indx[jcol]];
81
82     difvv = v[indx[icol]] - v[indx[jcol]];
83     difE = E[indx[icol]]/m[indx[icol]] - E[indx[jcol]]/m[indx[jcol]];
84     coltime[icol] = -(2.*difvv)/difE;
85     if(coltime[icol] < 0)
86         coltime[icol] = t1;
87     coltime[icol+N] = coltime[icol];;
88
89     difx1 = x[indx[icol+1]] - x[indx[icol+2]];
90     difv1 = v[indx[icol+1]] - v[indx[icol+2]];
91     difE1 = E[indx[icol+1]]/m[indx[icol+1]] - E[indx[icol+2]]/m[indx[icol+2]];
92     del1 = difv1*difv1 - 2.*difE1*difx1;
93     sqr1 = sqrt(del1);
94
95     if(del1 < 0)
96     {
97         coltime[icol+1] = t1;
98     }
99
100     if(del1 > 0)
101     {
102         coltime[icol+1] = (-difv1 + sqrt(del1))/difE1;
103         if(coltime[icol+1] < 0)
104             coltime[icol+1] = t1;
105     }
106
107     fiicol = fmod(icol+N+1, NN);
108     coltime[fiicol] = coltime[icol+1];
109     in = icol+N;
110     difx2 = x[indx[in-1]] - x[indx[in]];
111     difv2 = v[indx[in-1]] - v[indx[in]];
112     difE2 = E[indx[in-1]]/m[indx[in-1]] - E[indx[in]]/m[indx[in]];
113     del2 = difv2*difv2 - 2.*difE2*difx2;
114     sqr2 = sqrt(del2);
115

```

```

116         if(del2 < 0)
117         {
118             coltime[icol-1+N] = t1;
119         }
120
121         if(del2 > 0 )
122         {
123             coltime[icol-1+N] = (-difv2 + sqrt(del2))/difE2;
124             if(coltime[icol-1+N] < 0)
125                 coltime[icol-1+N] = t1;
126         }
127
128         ficol = fmod(icol+NN-1, NN);
129         ii = icol+N-1;
130         coltime[ficol] = coltime[ii];
131     }
132
133     if(*kesc == -1)
134     {
135         for(jj = 1; jj < NN; jj++ )
136         {
137             indx[jj-1] = indx[jj];
138             coltime[jj-1] = coltime[jj];
139         }
140
141         indx[NN-1] = *iesc;
142         x[indx[NN-1]] = L;
143         coltime[NN-1] = coltime[N-1];
144     }
145
146     if(*kesc == 1)
147     {
148         for(jj = NN-2; jj >= 0; jj-- )
149         {
150             indx[jj+1] = indx[jj];
151             coltime[jj+1] = coltime[jj];
152         }
153
154         indx[0] = *iesc;
155         x[indx[0]] = -L;
156         coltime[0] = coltime[N];
157     }
158 }

```

## A.2 Modelo cosHMF

Referente ao modelo cosHMF, o método de integração que utilizamos é o leapfrog. Portanto, apresentaremos a estruturação do algoritmo e algumas funções relevantes ao programa.

### A.2.1 Algoritmo e códigos implementados

#### Algoritmo

A integração numérica ao modelo cosHMF pode ser realizada utilizando vários métodos de integração, o método leapfrog se faz vantajoso por ser um integrador simplético, permitindo ao método numérico conservar o espaço cinético. Além disso, o método não apresenta grandes dificuldades. À integração numérica, realizamos procedimentos padrões, como o cálculo da distribuição inicial de partículas, a magnetização que é pertinente ao sistema, por exemplo. Ademais, o laço principal do sistema é feito de acordo como o número de interações do sistema para um dado passo de tempo  $\Delta t$ , portanto, medimos o tempo final de simulação como  $t = N_{int} \times \Delta t$ . Toda a estruturação do método é visto no algoritmo 2.

---

#### Algoritmo 2: Modelo cosHMF

---

```

1 início
2 {
3   distribuição inicial();
4   magnetização();
5   energia();
6   medidas();
7   para ( $i_{int} = 0; i_{int} < N_{int}; i_{int} ++$ ) faça
8     {
9       magnetização();
10      integrador numérico();
11      energia();
12      medidas();
13     }
14   return 0;
15 }
```

---

#### Códigos implementados

Aqui apresentaremos a função principal do programa, o cálculo da magnetização e a função que realiza a integração numérica.

##### Função principal do programa

```

1 #include <stdio.h>
2 #include <math.h>
3 #include <stdlib.h>
4 #include "condicoes_iniciais.c"
5 #include "integrador.c"
```

```

6 #include "energia.c"
7 #include "momento.c"
8 #include "magnetizacao.c"
9
10 int main()
11 {
12     FILE *fin;
13     fin = fopen("parametros.dat", "r");
14
15     int N, i, j, tmax;
16     double h, E0, Et, P0, Pt, Mx, My, M, M0, phi, FM;
17
18     fscanf(fin, "%d\n", &N);
19     fscanf(fin, "%lf", &h);
20     fscanf(fin, "%d", &tmax);
21
22     double *q = (double*)malloc(N*sizeof(double));
23     double *p = (double*)malloc(N*sizeof(double));
24     double *F = (double*)malloc(N*sizeof(double));
25
26     condicoes_iniciais(N, q, p);
27     E0 = energia (N, q, p);
28     P0 = momento (N, p);
29     magnetizacao(N, q, &Mx, &My, &M0, &phi);
30
31     for(i = 0; i < tmax; i++)
32     {
33         magnetizacao(N, q, &Mx, &My, &M, &phi);
34         integrador(N, q, p, h, F, &Mx, &My);
35         Et = energia (N, q, p);
36         Pt = momento (N, p);
37
38     }
39
40     fclose(fin);
41     return 0;
42 }

```

## Magnetização

```

1 #include<stdio.h>
2 #include<math.h>
3 #include<stdlib.h>
4
5 void magnetizacao (int N, double q[], double *Mx, double *My, double *M, double *phi)
6 {
7     int i;
8
9     *Mx = 0.;
10    for (i = 0; i < N; i++)
11    {
12        *Mx += cos(q[i]);
13    }
14    *Mx = *Mx/(double)N;
15
16    *My = 0.;
17    for (i = 0; i < N; i++)
18    {
19        *My += sin(q[i]);
20    }
21    *My = *My/(double)N;
22

```

```
23     *M = sqrt(*Mx**(*Mx) + *My**(*My));
24     *phi = atan2(*My, *Mx);
25 }
```

### Integrador numérico

```
1  #include<stdio.h>
2  #include<math.h>
3  #include<stdlib.h>
4
5  #include "forca.c"
6
7  void integrador(int N, double q[], double p[], double h, double F[], double *Mx, double *My)
8  {
9      int i;
10
11     for(i = 0; i < N; i++ )
12     {
13         q[i] += h*0.5*p[i];
14     }
15
16     forca(N, q, h, F, &*Mx, &*My);
17
18     for(i = 0; i < N; i++)
19     {
20         p[i] += h*F[i];
21         q[i] += h*0.5*p[i];
22     }
23 }
```

#### A.2.2 Verificação do algoritmo

A escolha de um integrador simplético reside no fato que o mesmo conserva o espaço de fase, o que implica na conservação de energia. Portanto, para averiguar se o programa funciona bem, usamos como parâmetro a energia. Na figura A.3 apresentamos a evolução da energia total, cinética e potencial, onde constatamos a conservação de energia.

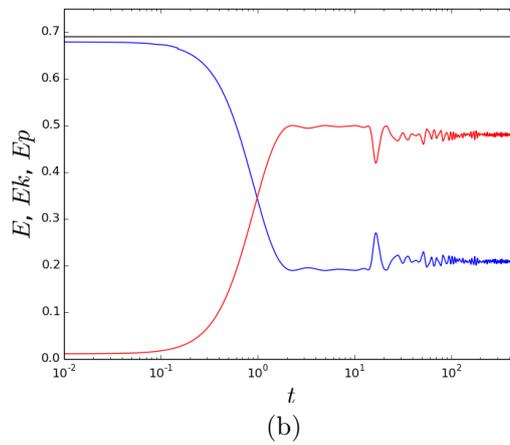
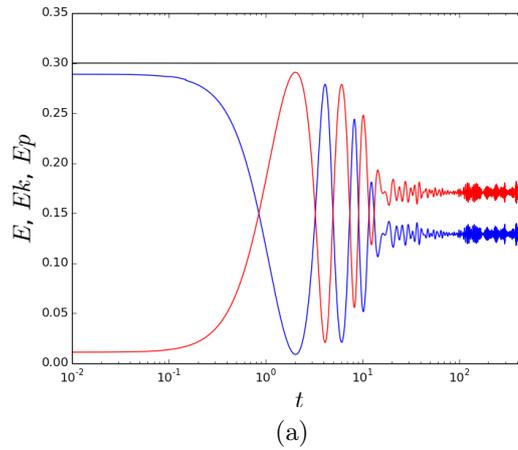


Figura A.3: Evolução da energia total (linha preta), energia cinética (linha azul) e energia potencial (linha vermelha) pelo tempo. Na figura (a) energia total de  $U = 0.3$  e figura (b)  $U = 0.69$ . Em todas as simulações realizadas referentes ao sistema cosHMF, utilizamos um passo numérico  $h = 0.001$ . Sistema composto por  $N = 10000$  e tempo final  $t = 500$ .

### A.3 Modelo cosHMF colisional

O método numérico proposto por nós consiste basicamente na utilização de dois métodos já conhecidos, o leapfrog e o event driven otimizado. Aqui apresentaremos a estruturação do algoritmo e todos os códigos utilizados para realização da dinâmica do modelo cosHMF colisional.

---

**Algoritmo 3:** Modelo cosHMF colisional

---

```

1 início
2 {
3   distribuição inicial();
4   energia();
5   magnetização();
6   indexação();
7   medidas();
8   para ( $i_{obs} = 0; i < N_{obs}; i ++$ ) faça
9     {
10    campo médio();
11    para ( $i = 0; i < N; i ++$ ) faça
12      {
13         $v[i] = v[i] + E[i] * t_{obs} / (2.0 * m[i]);$ 
14      }
15    para ( $i = 0; i < N; i ++$ ) faça
16      {
17         $E[i] = 0.0;$ 
18      }
19    cálculo dos tempos de colisão  $t_{i,j}()$ ;
20    enquanto ( $t < (i_{obs} + 1) * t_{obs}$ ) faça
21      {
22        dinâmica colisional();
23      }
24    campo médio();
25    para ( $i = 0; i < N; i ++$ ) faça
26      {
27         $v[i] = v[i] + E[i] * t_{obs} / (2.0 * m[i]);$ 
28      }
29    magnetização();
30    energia();
31    medidas();
32    }
33    energia();
34    return 0;
35 }

```

---

### A.3.1 Algoritmo e códigos implementados

#### Algoritmo

No algoritmo 3 iniciamos o sistema de maneira padrão, realizando a distribuição inicial das partículas, distribuindo os valores de posição e velocidade, utilizando a distribuição waterbag. Em seguida se calcula a energia que é o parâmetro de verificação do bom funcionamento do programa. Depois ordenamos as posições das partículas utilizando o método de indexação. Uma vez iniciado o programa, entramos no laço principal, que será dado pelo número de observações  $N_{obs}$  desejadas e cada observação terá uma duração estipulada por um tempo de observação  $t_{obs}$ , que será nosso passo no tempo. Desta maneira medimos o tempo total de simulação como  $t = N_{obs} \times t_{obs}$ .

Portanto, uma vez que o programa entra no laço principal, é calculado o campo médio para cada partícula  $i$  e em seguida a evolução da velocidade com um passo inteiro no tempo. Após zeramos o valor do campo médio, com isso calculamos os tempos de colisão entre as partículas. Uma vez obtidos os tempos de colisão, o programa inicia a condição para calcular a dinâmica de colisão, desta forma, enquanto houver colisões em um dado  $t_{obs}$  o programa executa da dinâmica de colisão. Realizada a dinâmica de colisão, o programa retorna ao cálculo do campo médio e depois evoluímos as velocidades com passo inteiro no tempo. Depois se calcula a magnetização, energia e realizamos as medidas físicas desejáveis. Após se retorna ao início do laço enquanto houver observações.

#### Códigos implementados

##### Função principal do programa

```
1 #include <stdio.h>
2 #include <stdlib.h>
3 #include <math.h>
4 #include <time.h>
5
6 #include "ran2.c"
7 #include "initial_conditions_wb.c"
8 #include "field_cos.c"
9 #include "magnetization.c"
10 #include "index.c"
11 #include "coltime.c"
12 #include "dynamicicos.c"
13 #include "progress_bar.c"
14
15 #include "energy.c"
16 #include "chargeandmasse.c"
17 #include "stat.c"
18
```

```

19 int main()
20 {
21     FILE *fin;
22     fin = fopen("inputcos.dat", "r");
23
24     int i, j, k, z, ztir, kesc, iobs, nob, nevent, ncol, nobst, nobsm;
25     double L, tl, tij, t, tphys, E0, En, Ek, Ep, twait, tobs, Kcos, error, Mx, My, MO, M, phi, e, P0, P, V, VAR,
        KUR, TEMP, MAGN;
26     unsigned long N;
27     long int a;
28     nevent = 0;
29     ncol = 0;
30
31     L = 2.*M_PI;
32     fscanf(fin, "%lu\n", &N);
33     fscanf(fin, "%lf\n", &tl);
34     fscanf(fin, "%lf\n", &Kcos);
35     fscanf(fin, "%d\n", &ztir);
36     fscanf(fin, "%d\n", &nob);
37     fscanf(fin, "%lf\n", &tobs);
38     fscanf(fin, "%lf\n", &e);
39     printf("\nN = %lu\n", N);
40     printf("\nKcos = %lf\n", Kcos);
41     printf("\nz repetitions = %d\n", ztir);
42     printf("\nob number = %d\n", nob);
43     printf("\nob time = %lf\n", tobs);
44     printf("\nenergy input = %lf\n", e);
45
46     double *x = (double*)malloc(N*sizeof(double));
47     double *v = (double*)malloc(N*sizeof(double));
48     double *m = (double*)malloc(N*sizeof(double));
49     double *E = (double*)malloc(N*sizeof(double));
50     double *Ezero = (double*)malloc(N*sizeof(double));
51     unsigned long *indx = (unsigned long*)malloc(N*sizeof(unsigned long));
52     double *coltime = (double*)malloc(N*sizeof(double));
53     int *partnr = (int*)malloc(N*sizeof(int));
54
55     a = -101;
56     candm(N, m, a);
57     initial_conditions_wb(N, x, v, m, a, MO, e);
58
59     E0 = energy(N, x, v, m, &Ek, &Ep);
60     vecmag(N, x, &My, &Mx, &MO, &phi);
61
62     printf("\n The initial value of Energy %g\n", E0);
63     printf("\n The initial value of magnetization %g\n", MO);
64
65     indexx(N, x-1, indx-1);
66     for(i = 0; i < N; i++)
67         indx[i] -= 1;
68
69     N = (int)N;
70
71     tphys = 0.0;
72     tij = 0.0;
73
74     statmes(N, v, &V, &VAR, &KUR);
75
76     fprintf(vari, "%g %g\n", tphys, VAR);
77     fprintf(kurt, "%g %g\n", tphys, KUR);
78     fprintf(vtot, "%g %g\n", tphys, V);
79

```

```

80         for(iobs = 0; iobs < nob; iobs++)
81         {
82             progress_bar((double) iobs/nob);
83
84             twait = tobs;
85             field_cos(N, indx, x, L, Kcos, E);
86
87             for (i=0 ; i<N ; i++)
88             {
89                 v[i] = v[i] + E[i] * tobs / (2.0 * m[i]) ;
90             }
91
92             mintime(N, coltime, partnr, L, x, v, indx);
93             while(tphys < (iobs + 1.)*tobs && twait > 0.0)
94             {
95                 kesc = 5;
96                 dynamic1(N, &tij, &tphys, &twait, t1, coltime, partnr, x, indx, v, m, L, &kesc)
97                 ;
98
99                 if(kesc == -1 || kesc == -1 || kesc == 0 )
100                {
101                    nevent += 1;
102                }
103                if(kesc == 0)
104                {
105                    ncol +=1;
106                }
107            }
108            field_cos(N, indx, x, L, Kcos, E);
109
110            for (i=0 ; i<N ; i++)
111            {
112                v[i] = v[i] + E[i] * tobs / (2.0 * m[i]) ;
113            }
114
115            vecmag(N, x, &My, &Mx, &M, &phi);
116            En = energy(N, x, v, m, &Ek, &Ep);
117            error = (En-E0)/E0;
118            statmes(N, v, &V, &VAR, &KUR);
119        }
120
121
122        fprintf(check, "%d %ld %d %d %lf %lf %lf", z, a, nevent, ncol, E0, En, error);
123        fprintf(check, "\n");
124
125        progress_bar(1.0);
126        printf("\n");
127        printf("\n Number of event %d and collision %d\n", nevent, ncol);
128        printf("\n The physical time is %g\n", tphys);
129        printf("\n The final value of Energy %g\n", En);
130        printf("\n The final value of energy error is %lf\n", error);
131
132        fclose(fin);
133        return 0;
134    }

```

### Condição inicial waterbag

```

1 #include <stdio.h>
2 #include <stdlib.h>
3 #include <math.h>

```

```

4  #include "ran2.c"
5  #include <time.h>
6
7  double energy(unsigned long N , double [], double [], double [], double [], double []);
8
9  void initial_conditions_wb(unsigned long N, double x[], double v[], double m[], long int a, double M0, double e)
10 {
11
12     int i;
13     double p_cm, k_s, k_w, A, bac, alpha, mx, my, deltaq, deltap, Ek, Ep;
14     long int *seed=&a;
15
16     alpha = 0.;
17     deltaq = M_PI/6.;
18     mx = (2./deltaq)*( sin(deltaq/2.) )*cos(alpha);
19     my = (2./deltaq)*( sin(deltaq/2.) )*sin(alpha);
20     M0 = sqrt(mx*mx + my*my);
21     deltap = sqrt( 24.*e - 12.*( 1. - M0*M0 ));
22     deltap = deltap/2.;
23     deltaq = deltaq/2.;
24
25     do
26     {
27         for(i = 0; i < N; i++ )
28         {
29             x[i] = (2.*ran2(seed) - 1.)*deltaq + alpha;
30             v[i] = (2.*ran2(seed)-1.)*deltap/m[i];
31         }
32
33         k_w = 0.;
34         for( i = 0; i < N; i++ )
35             k_w += v[i]*v[i];
36
37         k_w *= 0.5;
38         printf("\n test out 1 \n");
39         p_cm = 0.;
40         for( i = 0; i < N; i++ )
41             p_cm += v[i];
42
43         p_cm /= (double)N;
44         for(i=0; i<N; i++ )
45             v[i] -= p_cm;
46
47         k_s = 0.;
48         for(i=0; i<N; i++)
49             k_s += v[i]*v[i];
50
51         k_s *= 0.5;
52
53         A = sqrt(k_w/k_s);
54         for(i=0; i<N; i++)
55             v[i] = A*v[i];
56         bac = energy(N, x, v, m, &Ek, &Ep);
57
58     }
59     while( fabs(e - bac) > 0.0001 );
60     return;
61
62
63 }

```

### Função energia

```

1 #include <stdio.h>
2 #include <stdlib.h>
3 #include <math.h>
4
5 double energy(unsigned long N, double x[], double v[], double m[], double *Ek, double *Ep)
6 {
7     int i, j;
8     double E1, E2, mx, my, M, M2;
9     N = (int)N;
10    E1 = E2 = 0.;
11
12    for( i = 0; i < N; i++ )
13        E1 += m[i]*v[i]*v[i];
14
15    E1 /= 2.*(double)N;
16    *Ek = E1;
17
18    mx = my = 0.;
19
20    for(i = 0; i < N; i++)
21    {
22        mx += cos(x[i]);
23        my += sin(x[i]);
24    }
25
26    mx = mx/( (double)N );
27    my = my/( (double)N );
28    M2 = mx*mx + my*my;
29
30    E2 = 0.5*(1. - M2);
31    *Ep = E2;
32
33    return (E1+E2);
34 }

```

### Função magnetização

```

1 #include<stdio.h>
2 #include<math.h>
3 #include<stdlib.h>
4
5 void vecmag (unsigned long N, double x[], double *Mx, double *My, double *M, double *phi)
6 {
7     int i;
8     *Mx = 0.;
9     *My = 0.;
10    for(i = 0; i < N; i++)
11    {
12        *Mx += cos(x[i]);
13        *My += sin(x[i]);
14    }
15    *Mx = *Mx/(double)N;
16    *My = *My/(double)N;
17
18    *M = sqrt(*Mx*( *Mx) + *My*( *My));
19    *phi = atan2(*My, *Mx);
20 }

```

### Função campo médio

```

1 #include <stdio.h>

```

```

2 #include <stdlib.h>
3 #include <math.h>
4 #include <time.h>
5
6 void field_cos(unsigned long N, unsigned long indx[], double x[], double L, double Kcos, double E[])
7 {
8     int i, j;
9     double A, Mx, My;
10    N = (int)N;
11
12    Mx = 0.0 ;
13    My = 0.0 ;
14
15    for (i=0 ; i < N ; i++)
16    {
17        Mx += cos(x[i]);
18        My += sin(x[i]);
19    }
20
21    for(i = 0; i < N; i++)
22    {
23        A = Mx*sin(x[i]) - My*cos(x[i]) ;
24        E[i] = -A*Kcos/N;
25    }
26 }

```

### Função para o cálculo de $t_{i,j}$

```

1 #include <stdio.h>
2 #include <stdlib.h>
3 #include <math.h>
4
5 void mintime(unsigned long N, double coltime[], int partnr[], double L, double x[], double v[], unsigned long indx[])
6 {
7     int i, j, k;
8     double t1, tij, difx, difv;
9
10    t1 = 1.e6;
11
12    for(i = 0; i < N; i++)
13    {
14        coltime[i] = t1;
15        partnr[i] = N;
16    }
17
18    for(i = 0; i < N; i++)
19    {
20        coltime[i] = t1;
21        j = i+1;
22        difx = x[indx[i]] - x[indx[j]];
23        difv = v[indx[i]] - v[indx[j]];
24        tij = - difx/difv;
25
26        if(tij > 0 && tij < coltime[i])
27        {
28            coltime[i] = tij;
29            partnr[indx[i]] = indx[j];
30        }
31        else
32        {
33            coltime[i] = t1;
34        }

```

```

35     }
36 }

```

### Função dinâmica de colisões

Devemos ressaltar que nesta função faremos a triagem do menor tempo de colisão  $t_{i,j}$ . Ademais, também calculamos o tempo em que uma partícula possa sair pela extremidade esquerda ou direita do sistema, caso o tempo em que uma partícula saia por uma das extremidades seja menor que os tempos de colisão, consideraremos esse tempo de saída com um evento físico.

Notemos que diferentemente do modelo de folhas, neste programa calculamos o  $t_{i,j}$  de todas partículas antes de entrar na condição de colisão, pois a cada observação temos a variação do campo percebido por cada partícula. Portanto, para evitar um cálculo mais dispendioso, durante a condição de colisão utilizamos o método event driven otimizado.

```

1  #include <stdio.h>
2  #include <stdlib.h>
3  #include <math.h>
4
5  void dynamic1(unsigned long N, double *tij, double *tphys, double *twait, double t1, double coltime[], int partnr[],
6             double x[], unsigned long indx[], double v[], double m[], double L, int *kesc)
7  {
8     int i, icol, jcol, j, jj, k, iesc;
9     double difv, tout0, toutN, M, vcm;
10
11     N = (int)N;
12
13     *kesc = 2;
14     *tij = *twait;
15
16     for(k = 0; k < N; k++)
17     {
18         if(coltime[k] < *tij)
19         {
20             *tij = coltime[k];
21             icol = k;
22             *kesc = 0;
23         }
24
25         toutN = (L - x[indx[N-1]])/v[indx[N-1]];
26         tout0 = -(L + x[indx[0]])/v[indx[0]];
27
28         if(tout0 < *tij && tout0 > 0)
29         {
30             *tij = tout0;
31             *kesc = -1;
32             iesc = indx[0];
33         }
34
35         if(toutN < *tij && toutN > 0)
36         {
37             *tij = toutN;
38             *kesc = 1;
39             iesc = indx[N-1];
40         }

```

```

41
42     *tphys += *tij;
43     *twait -= *tij;
44
45     for(k = 0; k < N; k++)
46     {
47         coltime[k] = coltime[k] - *tij;
48         x[indx[k]] = x[indx[k]] + v[indx[k]]*(*tij);
49     }
50
51     if(*kesc == 0)
52     {
53         if(icol == N-1)
54         {
55             jcol = 0;
56         }
57         if(icol == N)
58         {
59             icol = 0;
60             jcol = 1;
61         }
62         else
63         {
64             jcol = icol + 1;
65         }
66
67         if(icol == N-1 && jcol == N)
68         {
69             jcol = 0;
70             M = m[indx[icol]] + m[indx[0]];
71             vcm = (m[indx[icol]]*v[indx[icol]] + m[indx[0]]*v[indx[0]])/M;
72             difv = -(v[indx[icol]] - v[indx[0]]);
73             v[indx[icol]] = vcm + (m[indx[0]]/M)*difv;
74             v[indx[0]] = vcm - (m[indx[icol]]/M)*difv;
75
76         }
77         if(icol == N)
78         {
79             jcol = 1;
80             M = m[indx[0]] + m[indx[1]];
81             vcm = (m[indx[0]]*v[indx[0]] + m[indx[1]]*v[indx[1]])/M;
82             difv = -(v[indx[icol]] - v[indx[0]]);
83             v[indx[0]] = vcm + (m[indx[1]]/M)*difv;
84             v[indx[1]] = vcm - (m[indx[0]]/M)*difv;
85
86         }
87         else
88         {
89             M = m[indx[icol]] + m[indx[jcol]];
90             vcm = (m[indx[icol]]*v[indx[icol]] + m[indx[jcol]]*v[indx[jcol]])/M;
91             difv = -(v[indx[icol]] - v[indx[jcol]]);
92             v[indx[icol]] = vcm + (m[indx[jcol]]/M)*difv;
93             v[indx[jcol]] = vcm - (m[indx[icol]]/M)*difv;
94         }
95
96
97         if(icol == N-2 && jcol == N-1)
98         {
99
100             coltime[N-1] = -(x[indx[N-1]] - x[indx[0]])/(v[indx[N-1]] - v[indx[0]]);
101             //jcol = 0;
102             if(coltime[N-1] < 0)

```

```

103             coltime[N-1] = t1;
104         }
105         if(icol == N-1)
106         {
107             coltime[0] = -(x[indx[0]] - x[indx[1]])/(v[indx[0]] - v[indx[1]]);
108             if(coltime[0] < 0)
109                 coltime[0] = t1;
110         }
111         else
112         {
113             coltime[icol+1] = -(x[indx[icol+1]] - x[indx[icol+2]])/(v[indx[icol+1]] - v[indx[icol+2]]);
114             if(coltime[icol+1] < 0)
115                 coltime[icol+1] = t1;
116         }
117     }
118
119     if(icol == 0)
120     {
121         coltime[N-1] = -(x[indx[N-1]] - 2*L - x[indx[icol]])/(v[indx[N-1]] - v[indx[icol]]);
122         if(coltime[N-1] < 0)
123             coltime[N-1] = t1;
124     }
125     else
126     {
127         coltime[icol-1] = -(x[indx[icol-1]] - x[indx[icol]])/(v[indx[icol-1]] - v[indx[icol]]);
128         if(coltime[icol-1] < 0)
129             coltime[icol-1] = t1;
130     }
131
132     coltime[icol] = t1;
133 }
134
135 if(*kesc == -1)
136 {
137     for(jj = 1; jj < N; jj++ )
138     {
139         indx[jj-1] = indx[jj];
140         coltime[jj-1] = coltime[jj];
141     }
142     indx[N-1] = iesc;
143     x[indx[N-1]] = L;
144 }
145 }
146
147 if(*kesc == 1)
148 {
149     for(jj = N-2; jj >= 0; jj-- )
150     {
151         indx[jj+1] = indx[jj];
152         coltime[jj+1] = coltime[jj];
153     }
154     indx[0] = iesc;
155     x[indx[0]] = -L;
156 }
157 }

```

### A.3.2 Verificação do Algoritmo

Apresentamos por fim, um parâmetro de medida para verificar o bom funcionamento do algoritmo proposto e criado por nós, a conservação de energia, como segue nas figuras abaixo.

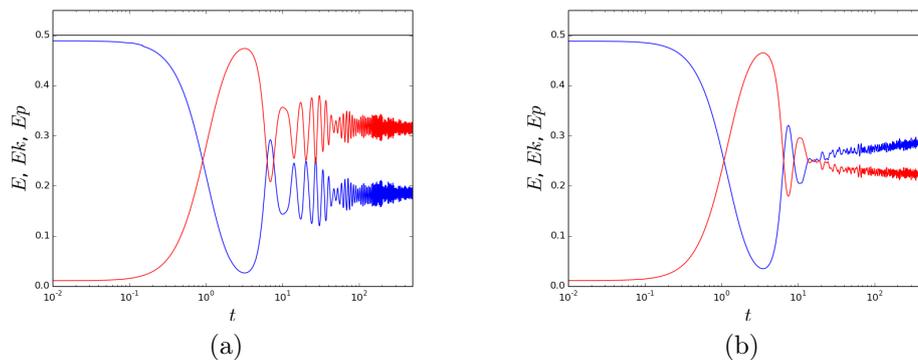


Figura A.4: Gráfico da evolução da energia total (cinza), cinética (azul) e potencial (vermelha) pelo tempo. Simulação realizada com  $N = 2000$  sendo 200 com massa  $m = 5$ , tempo total de  $t = 500$  e energia  $U \simeq 0.5$ . (a) Sistema *cosHMF* sem colisões. (b) Sistema *cosHMF* com colisões.

# Referências Bibliográficas

- [1] T. Dauxois, S. Ruffo, E. Arimondo, and M. Wilkens, *Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long Range Interactions*, Lecture Notes in Physics, Vol. 602 (Berlin: Springer) 2002.
- [2] M. Kac, Phys. of Fluid. **2**, 8 (1963).
- [3] H. B. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics* (New York: John Wiley and Sons) 2a ed. 1985.
- [4] A. R. Leach, *Molecular Modelling: Principles and Applications* (Dorset: Pearson Education) 2001.
- [5] I. Goldhirsch, Annu. Rev. Fluid Mech. **35**, 267 (2003).
- [6] S. Salinas, *Introdução à Física Estatística* (São Paulo: EdUSP) 2008.
- [7] H. M. Jaeger, S. R. Nagel, R. P. Behringer, Physics Today **49**, 32 (1996).
- [8] A. M. M. Polito, *O Método da Função Característica Empírica Aplicado à Dinâmica Molecular de Gases Granulares*, tese de doutorado (Universidade de Brasília) 2006.
- [9] G. M. Kremer, *Uma introdução à equação de Boltzmann* (São Paulo: EdUSP) 2005.
- [10] B. J. Alder, T. E. Wainwright, J. Chem. Phys. **31**, 459 (1959).
- [11] M. P. Allen, D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Oxford: Oxford University Press) 1987.
- [12] M. P. Allen, D. Frenkel, J. Talbot, Comp. Phys. Rep. **9**, 301 (1989).
- [13] M. N. Bannerman, S. Strobl, A. Formella, T. Pöschel, Comp. Part. Mech. **1**, 191 (2014).

- [14] A. Campa, T. Dauxois, S. Ruffo, Phys. Rep. **480**, 57 (2009).
- [15] T. Padmanabhan, Phys. Rep. **188**, 285 (1990).
- [16] Y. Elskens, D. Escande, *Microscopic Dynamics of Plasmas and Chaos* (Bristol: IOP Publishing) 2002.
- [17] D. H. E. Dubin, T. M. O'Neil, Rev. Mod. Phys. **71**, 87 (1999).
- [18] D. C. Brydges, P. A. Martin, J. Stat. Phys. **96**, 1163 (1999).
- [19] D. Lynden-Bell, Phys. A. **263**, 293 (1999).
- [20] D. Lynden-Bell, Mon. Not. R. Astron. Soc. **136**, 101 (1967).
- [21] Y. Y. Yamaguchi, J. Barré, F. Bouchet, T. Dauxois, S. Ruffo, Phys. A **337**, 36 (2004).
- [22] S. Chandrasekhar, Principles of Stellar Dynamics (New York: Dover Phoenix) 1942.
- [23] J. L. Rouet and M. R. Feix, Phys. Rev. E **59**, 73 (1999).
- [24] F. Hohl and J. Campbell, Astron. J. **73**, 611 (1968).
- [25] S. Goldstein, S. Cuperman, M. Lecar, Mon. Not. R. Astron. Soc. **143**, 209 (1969).
- [26] M. Lecar, L. Cohen, Astrophys. Space Sci. **13**, 397 (1971).
- [27] Y. Levin, R. Pakter, T. N. Teles, Phys. Rev. Lett. **100**, 040604 (2008).
- [28] T. N. Teles, Y. Levin, R. Pakter, F. B. Rizzato, J. Stat. Mech. Theor. Exp. (2010) P05007.
- [29] R. Pakter, Y. Levin, e-print arXiv:1012.0035 (2010).
- [30] Y. Yamaguchi, Phys. Rev. E **78**, 041114 (2008).
- [31] S. Tremaine, M. Henon, D. Lynden-Bell, Mon. Not. R. Astron. Soc. **219**, 285 (1986).
- [32] I. Arad, D. Lynden-Bell, Mon. Not. R. Astron. Soc. **361**, 385 (2005).
- [33] G. Rybicki, Astrophys. Space Sci. **14**, 56 (1971).
- [34] T. Tsuchiya, N. Gouda, T. Konishi, Phys. Rev. E **53**, 2210 (1996).
- [35] B. N. Miller, Phys. Rev. E **53**, 4279 (1996).

- [36] K. R. Yawn, B. N. Miller, Phys. Rev. E **68**, 056120 (2003).
- [37] M. Joyce, T. Worrakitpoonpon, J. Stat. Mech. Theor. Exp. (2010) P10012.
- [38] P. Kumar, B. N. Miller, Phys. Rev. E **90**, 062918 (2014).
- [39] J. L. Rouet, M. R. Feix, Phys. Fluids B **3**, 1830 (1991).
- [40] B. N. Miller, J. L. Rouet, Phys. Rev. E **82**, 066203 (2010).
- [41] Caroline Sandoz, *Structures Turbulentes de Petites Echelles dans le Problème à N Corps : Application aux Plasmas Unidimensionnels et aux Rotateurs Couplés*, tese de doutorado (Université de Provence) 1995.
- [42] Y. Levin, R. Pakter, F. B. Rizzato, T. N. Teles, F. P. C. Benetti, Phys. Rep. **535**, 1 (2014).
- [43] M. Antoni, S. Ruffo, Phys. Rev. E **52**, 2361 (1995).
- [44] Y. Sota, O. Iguchi, M. Morikawa, T. Tatekawa, K. I. Maeda, Phys. Rev. E **64**, 056133 (2001).
- [45] T. Tatekawa, F. Bouchet, T. Dauxois, S. Ruffo, Phys. Rev. E **71**, 056111 (2005).
- [46] K. Jain, F. Bouchet, D. Mukamel, J. Stat. Mech. P11008 (2007).
- [47] T. M. Rocha Filho, M. A. Amato, A. Figueiredo, J. Phys. A: Math. Theor. **42**, 165001 (2009).
- [48] S. Gupta, D. Mukamel, Phys. Rev. Let **105**, 040602 (2010).
- [49] S. Gupta, D. Mukamel, J. Stat. Mech. P08026 (2010).
- [50] A. Campa, A. Giansanti, G. Moreli, Phys. Rev. E **76**, 041117 (2007).
- [51] T. M. Rocha Filho, M. A. Amato, A. E. Santana, A. Figueiredo, J. R. Steiner, Phys. Rev. E **89**, 032116 (2014).
- [52] Y. Y. Yamaguchi, J. Barré, F. Bouchet, T. Dauxois, S. Ruffo, Physica (Amsterdam) **337A**, 36 (2004).
- [53] J. Barré, F. Bouchet, T. Dauxois, S. Ruffo, Y. Y. Yamaguchi, Physica A, **365**, 177 (2006).

- [54] T. M. Rocha Filho, A. E. Santana, M. A. Amato, A. Figueiredo, *Phys. Rev. E* **90**, 0302133 (2014).
- [55] T. M. Rocha Filho, *Comp. Phys. Com.* **185**, 1364 (2014).
- [56] G. D. Birkhoff, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **17**, 656 (1931).
- [57] D. Mukamel, S. Ruffo, N. Schreiber, *Phys. Rev. Let* **95**, 240604 (2015).
- [58] F. Borgonovi, G. L. Celardo, M. Maianti, E. Pedersoli, *J. Stat. Phys.* **116**, 1435 (2004).
- [59] F. Bouchet, T. Dauxois, D. Mukamel, S. Ruffo, *Phys. Rev. E* **77**, 011125 (2008).
- [60] A. Pluchino, A. Rapisarda, C. Tsallis, *Eur. Phys. Let.* **80** 26002 (2007).
- [61] A. Figueiredo, T. M. Rocha Filho, M. A. Amato, *Eur. Phys. Let.* **83**, 30011 (2008).
- [62] F. P. C. Benetti, T. N. Teles, R. Pakter, Y. Levin, *Phys. Rev. Let.* **108**, 140601 (2012).
- [63] A. Figueiredo, T. M. Rocha Filho, M. A. Amato, Z. T. Oliveira, R. Matsushita, *Phys. Rev. E* **89**, 022106 (2014).
- [64] A. C. Ribeiro-Teixeira, F. P. C. Benetti, R. Pakter, Y. Levin, *Phys. Rev. E* **89**, 022130 (2014).
- [65] A. Pluchino, V. Latora, A. Rapisarda, *Continuum Mech. Thermodyn.* **16**, 245 (2004).
- [66] F. Bouchet, T. Dauxois, *Phys. Rev. E* **72**, 045103 (2005).
- [67] A. Pluchino, A. Rapisarda, *AIP Conference Proceedings* **965**, (2007).
- [68] Y. Y. Yamaguchi, F. Bouchet, T. Dauxois, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2007**, P01020 (2007).
- [69] B. V. Ribeiro, M. A. Amato, Y. Elskens, *Phys. Scr.* **91**, 084004 (2016).
- [70] J. Barré, F. Bouchet, T. Dauxois, S. Ruffo, *Jour. Stat. Phys.* **119**, 677 (2005).
- [71] T. M. Rocha Filho, A. Figueiredo, M. A. Amato, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 190601 (2005).
- [72] A. Antoniazzi, D. Fanelli, J. Barré, P. Chavanis, T. Dauxois, S. Ruffo, *Phys. Rev. E* **75**, 011112 (2007).

- [73] T. M. Rocha Filho, J. Phys. A: Math. Theor. **49**, 185002 (2016).
- [74] R. Pakter, Y. Levin, J. Stat. Mech. **2017**, 044001 (2017).
- [75] T. M. Rocha Filho, M. A. Amato, B. A. Mello, A. Figueiredo, Phys. Rev. E **84**, 041121 (2011).
- [76] T. M. Rocha Filho, M. A. Amato, A. Figueiredo, Phys. Rev. E **85**, 062103 (2012).
- [77] B. V. Ribeiro, *Abordagens Dinâmica e Estocástica na Descrição de Processos Físicos na Física de Plasmas*, tese de doutorado (Universidade de Brasília) 2014.
- [78] E. Hairer, C. Lubich, G. Wanner, *Geometric Numerical Integration* (Berlin: Springer) 2006.
- [79] L. H. Miranda Filho, *Caos em Sistemas Hamiltonianos: Métodos Numéricos para o Cálculo dos Expoentes de Lyapunov*, tese de doutorado (Universidade de Brasília) 2016.
- [80] J. F. Nagle, Phys. Rev. A. **2**, 2125 (1970).
- [81] J. F. Nagle, J. C. Bonner, J. Chem. Phys. **54**, 729 (1971).
- [82] M. Kadar, Phys. Rev. B. **28**, 244 (1983).
- [83] A. Campa, A. Giansanti, D. Mukamel, S. Ruffo, Phys. A. **365**, 120 (2006).
- [84] T. Dauxois, P. de Buyl, L. Lori, S. Ruffo, Journ. Stat. Mech: Theor and Exp. P06015 (2010).
- [85] F. Bouchet, S. Gupta, D. Mukamel, Phys. A. **389**, 4389 (2010).
- [86] L. H. Miranda Filho, M. A. Amato, Y. Elskens, T. M. Rocha Filho, Com. Non. Sci. Num. Sim. **74**, 236 (2019).
- [87] F. L. Antunes, F.C. Benetti, R. Pakter, Y. Levin, Phys. Rev. E. **92**, 052123 (2015).
- [88] M. K. Müller, S. Luding, Math. Model. Nat. Phenom. **6**, 118 (2011).
- [89] S. Gonzalez, A. R. Thornton, S. Luding, Eur. Phys. J. Special Topics **223**, 2205 (2014).
- [90] Steiner, J.R., Zolacir, T.O, Physica A-Statistical Mechanics and its Applications **491**, 964 (2018).
- [91] I. Melo, A. Figueiredo, T. M. Rocha Filho, L. H. Miranda Filho, Y. Elskens, *arXiv: 1909.03696v1*. Artigo submetido à revista *Communication in Nonlinear Science and Numerical Simulation*.