

**Cíntia Helena Claudino Silvestre**

# **Ergodicidade em sistemas autogravitantes**

Brasília, DF, Brasil.

23 de agosto de 2016.

**Cíntia Helena Claudino Silvestre**

## **Ergodicidade em sistemas autogravitantes**

Tese apresentada ao Instituto de Física da  
Universidade de Brasília como parte dos  
requisitos necessários para obtenção do tí-  
tulo de Doutora em Física.

Orientador:

Tarcísio Marciano da Rocha Filho

INSTITUTO DE FÍSICA  
UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

Brasília, DF, Brasil.

23 de agosto de 2016.



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

---

Cecília Meireles

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

# Agradecimentos

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

À minha família adorada que foi e é um verdadeiro sustentáculo em minha vida, por todo carinho, compreensão e apoio. Ao meu amado Estéfano Pietragalla, meu companheiro sob toda e qualquer circunstância, quem sempre me acalma e traz a paz necessária. Sou muito grata pela sua compreensão e paciência incondicionais.

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

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

Aos meus amigos fora da vida acadêmica que sempre me acompanham e apoiam incondicionalmente e foram capazes de compreender meus momentos de ausência em virtude desta labuta.

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

Agradeço também à CAPES pelo apoio financeiro a este trabalho.

# Resumo

Sistemas com interações de longo alcance têm sido extensivamente estudados nas últimas duas décadas. Alguns exemplos são Sistemas autogravitantes, plasmas não-neutros, outros exemplos incluem diferentes modelos, como Modelo Hamiltoniano de Campo Médio (HMF) e interação onda-partícula. Uma interação é considerada de longo alcance se ela decai com  $r^{-\alpha}$  em que  $\alpha \leq d$  em que  $d$  é a dimensão do espaço. Esses sistemas podem apresentar comportamentos peculiares não observados para sistemas com interações de curto alcance: calor específico negativo, difusão anômala, inequivalência de ensembles e relaxação violenta. No presente trabalho vamos discutir o comportamento da propriedade ergódica para sistemas autogravitantes em uma e duas dimensões através do uso de simulações em placas de vídeo. Três abordagens são usadas: primeiro consideramos a evolução temporal do desvio padrão tomado sobre todas as partículas da média temporal da velocidade de cada partícula. A segunda abordagem consiste em determinar a estatística dos tempos de visitação de cada partícula nas células no espaço dos momentos e a terceira abordagem é feita pelo método do funcional dinâmico. Mostramos que para os sistemas autogravitantes com o fator de Kac o sistema é sempre ergódico embora seja necessário um tempo considerável para isso. No entanto, se o fator de Kac não for utilizado, então o tempo necessário para o sistema ser ergódico diverge com o crescimento de  $N$ , i. e. o sistema é estritamente não-ergódico somente no limite de  $N \rightarrow \infty$ . Além disso, abordamos a construção de Maxwell para o modelo do Anel.

# Abstract

Systems with long range interactions have been extensively studied in the last two decades. Self-gravitating systems and non-neutral plasmas have been studied for a much longer time. Other examples include many different models such as Hamiltonian Mean Field (HMF) model, wave-particle interaction and one and two-dimensional self-gravitating systems. A pair interaction potential is considered long-ranged if it decays at large distances as  $r^{-\alpha}$ , with  $\alpha \leq d$ , where  $d$  is the spatial dimension. These systems present many peculiar behaviors not observed for short-range interactions: negative heat capacity, anomalous diffusion, ensemble inequivalence and violent relaxation. In the present work we discuss the ergodic property behavior in two-dimensional self-gravitating systems using state of the art dynamical simulations on a Graphics Processing Unit. Three approaches are used: we first consider the evolution of the standard deviation taken over all the particles of the temporal average speed of each particle. The second approach is to determine the statistics of visitation time of each particle within the cells of times and the third approach is taken by the dynamic functional method. We show that, for auto-gravitantes systems with Kac factor of the system is always ergodic, although a considerable time this is necessary, however, if the Kac factor is not used, then the time required for the system to be ergodic diverges with growth of  $N$ , i. e. the system is strictly non-ergodic only in the limit  $N \rightarrow \infty$ . In addition to approach the construction of Maxwell to the ring model.

# Sumário

## Lista de Figuras

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>17</b>
<b>2</b>	<b>Primeiros Conceitos</b>	<b>21</b>
2.1	Interações de longo alcance: Uma visão geral . . . . .	21
2.1.1	Exemplos de sistemas e modelos com interação de longo alcance	22
2.2	Propriedades dos sistemas de interação de longo alcance . . . . .	25
2.2.1	Não-aditividade e extensividade . . . . .	25
2.2.2	Calor específico negativo . . . . .	26
2.2.3	Inequivalência de ensembles estatísticos . . . . .	29
<b>3</b>	<b>Dinâmica de Sistemas de muitos corpos com interações de longo alcance</b>	<b>31</b>
3.1	Espaço de Fase . . . . .	31
3.2	Estado quase estacionário - QSS . . . . .	32
3.3	Relaxação Violenta em sistemas com interações de longo alcance . . .	33
3.4	Teorema do Virial . . . . .	36
3.5	Teorema de Liouville . . . . .	39

## Sumário

3.6	Ergodicidade . . . . .	41
3.6.1	Método direto: Dispersão nas médias temporais das velocidades e posições de cada partícula . . . . .	51
3.6.2	Método <i>sojourn time</i> : Tempos de visitação em células no espaço dos momentos . . . . .	53
3.6.3	Método do Funcional Dinâmico . . . . .	55
<b>4</b>	<b>Modelos de Sistemas e Métodos Computacionais</b>	<b>58</b>
4.1	Modelos de Sistemas . . . . .	58
4.1.1	Método de soma de Ewald em uma dimensão . . . . .	58
4.1.2	Modelo do Anel ( <i>Ring Model</i> ) . . . . .	59
4.2	Método Monte Carlo . . . . .	61
4.3	Dinâmica Molecular . . . . .	62
4.3.1	Integrador Simplético . . . . .	62
<b>5</b>	<b>Resultados obtidos</b>	<b>67</b>
5.1	Construção de Maxwell em sistemas de interação de longo alcance - O caso do modelo do anel. . . . .	67
5.2	Propriedades de ergodicidade no modelo de Hamiltoniana de Campo Médio-HMF . . . . .	74
5.3	Propriedades de Ergodicidade em sistemas unidimensionais . . . . .	79
5.3.1	Análise da ergodicidade pela abordagem da dispersão nas médias temporais das velocidades de cada partícula . . . . .	79

## Sumário

5.3.2	Análise de ergodicidade pela estatística dos tempos de visita- ção em células no espaço dos momentos . . . . .	81
5.3.3	Análise de ergodicidade pelo método do funcional dinâmico . .	83
5.4	Propriedades de Ergodicidade em sistemas autogravitantes bidimen- sionais . . . . .	91
5.4.1	Análise da ergodicidade pela abordagem da dispersão nas mé- dias temporais das velocidades de cada partícula . . . . .	92
5.4.2	Análise de ergodicidade pela estatística dos tempos de visita- ção em células no espaço dos momentos . . . . .	95
5.4.3	Análise de ergodicidade pelo método do funcional dinâmico . .	96
<b>6</b>	<b>Conclusão</b>	<b>99</b>
	<b>Apêndice A - Algoritmos numéricos utilizados</b>	<b>101</b>
A.1	Integrador simplético . . . . .	101
A.2	Monte Carlo para ensemble microcanônico no equilíbrio para o mo- delo do Anel. . . . .	108
A.3	Monte Carlo para ensemble canônico no equilíbrio para o modelo do Anel. . . . .	116
	<b>Referências</b>	<b>125</b>

# Lista de Figuras

1	Esquema de evolução de um sistema com interação de longo alcance passando pela relaxação violenta. . . . .	33
2	Modelo do anel autogravitante com raio unitário. . . . .	60
3	a) Gráfico da entropia em função da energia. b) Inverso da temperatura $\beta$ em função da energia. A linha tracejada é a construção de Maxwell. . . . .	70
4	a) Entropia em função da energia no ensemble microcanônico para um sistema no modelo do Anel para o intervalo de energia $[-0.99, 0.2]$ . b) Temperatura em função da energia no ensemble microcanônico para um sistema no modelo do Anel para o intervalo de energia $[-0.99, 0.2]$ . . . . .	71
5	a) Energia livre em função da temperatura no ensemble canônico para um sistema no modelo do anel com $N = 5000$ b) Energia livre minimizada em função da temperatura. . . . .	72
6	a) Entropia em função da energia no ensemble canônico para um sistema no modelo do anel com $N = 5000$ partículas para o intervalo de energia $[-0.99, 0.2]$ . b) Temperatura em função da energia no ensemble canônico o intervalo de energia $[-0.99, 0.2]$ . . . . .	73

*Lista de Figuras*

- 7 Desvio padrão  $\sigma_{\bar{p}}$  na Eq. (3.45) para a média temporal da velocidade para o modelo HMF para alguns valores de  $N$  no equilíbrio termodinâmico. a) Energia por partícula  $e = 0.4$  (estado não-homogêneo). b) Análogo a (a) mas para o tempo com reescala de  $t \rightarrow t \times 5000/N$ . c) Energia por partícula  $e = 0.8$  (estado homogêneo). d) Análogo a (c) mas para o tempo com reescala de  $t \rightarrow t \times 5000/N$ . . . . . 75
- 8 À direita: histograma para o caso não-homogêneo na Fig. 7a, célula de tamanho  $\Delta p = 0.4$  e tempo total de simulação  $t_f = 10^7$ . À esquerda: histograma de frequência dos tempos de visitação no espaço dos momentos para o modelo HMF para o mesmo estado homogêneo da Fig. 7c, com células do espaço dos momentos com comprimento de  $\Delta p = 0.1$ , tempo total de simulação  $et_f = 10^6$ . Ambos os casos apresentam a cauda truncada. . . . . 76
- 9 Método do funcional dinâmico para o modelo HMF no estado de equilíbrio não-homogêneo para as mesmas condições da Fig. 7a. a)  $\text{Re}[Q(t)]$ ; b)  $\text{Im}[Q(t)]$ ; c)  $\text{Re}[E(t)]$ ; d)  $\text{Im}[E(t)]$  . . . . . 77
- 10 Método do funcional dinâmico para o modelo HMF no estado de equilíbrio homogêneo para as mesmas condições da Fig. 7c. a)  $\text{Re}[Q(t)]$ ; b)  $\text{Im}[Q(t)]$ ; c)  $\text{Re}[E(t)]$ ; d)  $\text{Im}[E(t)]$ . Para todos os casos, fazemos  $n = t$  com valores inteiros de  $t$ . . . . . 78
- 11 Gráficos são os mesmos , respectivamente, das Figs. 10a e 9a, mas com o tempo reescalando com  $t \rightarrow t \times N/5000$  em ambos casos. Para o caso homogêneo (gráfico da esquerda) os dados são muito bons, enquanto para o caso não-homogêneo, temos uma aproximação. . . . 79

*Lista de Figuras*

- 12 a) Desvio padrão na Eq. (3.45) para as variáveis  $\overline{p_x}$  de cada partícula para o sistema autogravitante em uma dimensão, com passo de tempo  $\Delta t = 0.01$ . b) Desvio padrão de  $\overline{x}$ . O fitting para a cauda de  $\sigma_{\overline{p_x}}(t)$  para  $N = 2048$  é dado por  $25.8 \times t^{-0.99}$ , para  $N = 4096$  é  $26.4 \times t^{-0.99}$  e, para  $N = 8192$  é dado por  $26.0 \times t^{-0.99}$ , já o fitting para a cauda de  $\sigma_{\overline{x}}(t)$  é, para  $N = 2048$ ,  $303.4 \times t^{-0.99}$ , para  $N = 4096$  é  $294.2 \times t^{-0.99}$  e  $287.4 \times t^{-0.99}$  para  $N = 8192$ . . . . . 80
- 13 a) Desvio padrão na Eq. (3.45) para as variáveis  $\overline{p_x}$  de cada partícula para o sistema autogravitante em uma dimensão, com passo de tempo  $\Delta t = 0.01$ . b) Desvio padrão de  $\overline{x}$ . O fitting para a cauda de  $\sigma_{\overline{p_x}}(t)$  para  $N = 2048$  é dado por  $25.8 \times t^{-0.99}$ , para  $N = 4096$  é  $26.4 \times t^{-0.99}$  e, para  $N = 8192$  é dado por  $26.0 \times t^{-0.99}$ , já o fitting para a cauda de  $\sigma_{\overline{x}}(t)$  é, para  $N = 2048$ ,  $303.4 \times t^{-0.99}$ , para  $N = 4096$  é  $294.2 \times t^{-0.99}$  e  $287.4 \times t^{-0.99}$  para  $N = 8192$ . . . . . 81
- 14 Histograma de frequência dos tempos de visitação no espaço dos momentos para sistema autogravitante para diferentes números de partículas  $N = 2048$ ,  $N = 4096$  e  $N = 8192$ . As simulações são para um tempo total  $t_f = 1000$  com passo de tempo  $dt = 0.2$ , momento inicial  $p_0 = 10.0$ , posição inicial  $r_0 = 10.0$  em uma dimensão com células do espaço dos momentos com comprimento de  $\Delta p = 0.5$ . . . . . 82
- 15 Histograma de frequência dos tempos de visitação no espaço dos momentos para sistema autogravitante em uma dimensão com  $p_0 = 3.14$  e as demais condições são as mesmas usadas na Fig. 14. . . . . 83

*Lista de Figuras*

- 16 Partes real e imaginária de  $Q(n)$  e  $E(n)$  nas Eq. (3.59) e (3.66) para o modelo de soma de Ewald e número de partículas  $N = 2048, 4096$  e  $8192$  para o momento como a variável estocástica. a)  $\text{Re}[Q(t)]$ ; b)  $\text{Im}[Q(t)]$ ; c)  $\text{Re}[E(t)]$ ; d)  $\text{Im}[E(t)]$ . Para todos os casos, fazemos  $n = t$  com valores inteiros de  $t$  e  $L=10.0$  . . . . . 84
- 17 a)Energia e b) distribuição das partículas no espaço de fase para o sistema nas mesmas condições da Fig. 16 mas apenas para  $N = 2048$ . 85
- 18 Partes real e imaginária de  $Q(n)$  e  $E(n)$  nas Eq. (3.59) e (3.66) para o modelo de soma de Ewald e número de partículas  $N = 2048, 4096$  e  $8192$  para o momento como a variável estocástica para o caso virializado. a)  $\text{Re}[Q(t)]$ ; b)  $\text{Im}[Q(t)]$ ; c)  $\text{Re}[E(t)]$ ; d)  $\text{Im}[E(t)]$ . Para todos os casos, fazemos  $n = t$  com valores inteiros de  $t$  e  $L=10.0$  . . . . 86
- 19 a)Energia e b) distribuição das partículas no espaço de fase para o sistema nas mesmas condições da Fig. 18 mas apenas para  $N = 2048$ . 87
- 20 Partes real e imaginária de  $Q(n)$  e  $E(n)$  nas Eq. (3.59) e (3.66) para o modelo de soma de Ewald e número de partículas  $N = 2048, 4096$  e  $8192$  para o momento como a variável estocástica. a)  $\text{Re}[Q(t)]$ ; b)  $\text{Im}[Q(t)]$ ; c)  $\text{Re}[E(t)]$ ; d)  $\text{Im}[E(t)]$ . Para todos os casos, fazemos  $n = t$  com valores inteiros de  $t$  e  $L = 10^{20}$ . . . . . 88
- 21 a)Energia e b) distribuição das partículas no espaço de fase para o sistema nas mesmas condições da Fig. 20 mas apenas para  $N = 2048$ . 89

*Lista de Figuras*

- 22 Partes real e imaginária de  $Q(n)$  e  $E(n)$  nas Eq. (3.59) e (3.66) para o modelo de soma de Ewald e número de partículas  $N = 2048, 4096$  e  $8192$  para o momento como a variável estocástica para o caso virializado. a)  $\text{Re}[Q(t)]$ ; b)  $\text{Im}[Q(t)]$ ; c)  $\text{Re}[E(t)]$ ; d)  $\text{Im}[E(t)]$ . Para todos os casos, fazemos  $n = t$  com valores inteiros de  $t$  e  $L = 10^{20}$ . . . . . 90
- 23 a) Energia e b) distribuição das partículas no espaço de fase para o sistema nas mesmas condições da Fig. 22 mas apenas para  $N = 2048$ . 91
- 24 a) Kurtose para a distribuição de momentos como uma função do tempo para os valores  $N$  para sistema autogravitante em duas dimensões. b) Posições das partículas na configuração usada como condição inicial para simulações para  $N = 4096$ . . . . . 93
- 25 a) Desvio padrão na Eq. (3.45) para as variáveis  $\bar{p}_x$  de cada partícula para o sistema autogravitante bidimensional, com passo de tempo de integração  $\Delta t = 0.05\epsilon$  e  $\epsilon = 10^{-3}$ . b) Desvio padrão de  $\bar{x}$ . O fitting para a cauda de  $\sigma_{\bar{p}_x}(t)$  é dado por  $48.4 \times t^{-1.02}$  e  $2271 \times t^{-0.99}$  for  $\sigma_{\bar{x}}(t)$ . 95
- 26 a) Tempos de visitação para células com comprimento  $\Delta p_x = 0.2$  na componente  $x$  do momento no espaço dos momentos para sistema autogravitante em duas dimensões para alguns distintos valores  $N$  com um tempo total de simulação  $t_f = 10^4$ . b) O mesmo que (a) mas para células de comprimento  $\Delta x = 0.2$  na componente  $x$  da posição e tempo total de simulação  $t_f = 10^5$ . . . . . 96

*Lista de Figuras*

27	a) Partes real e b) imaginária de $Q(n)$ na Eq. (3.59) Para a mesma simulação e número de partículas $N$ que o representado na Fig. 26 para a componente real $x$ do momento como a variável estocástica para o sistema autogravitante bidimensional. c) Partes real e d) imaginária de $E(n)$ na Eq. (3.66). . . . .	97
28	O mesmo que a Fig. 27 mas para a componente $x$ da posição como variável estocástica. . . . .	98

# 1 Introdução

Um sistema é classificado como com de longo alcance quando seu potencial de interação decresce com  $r^{-\alpha}$  em que  $\alpha \leq d$ , sendo  $d$  a dimensão do espaço [1]. O estudo de tais sistemas tem sido objeto de inúmeros trabalhos, mas ainda assim muitos aspectos relevantes carecem de maior exploração e descrição clara e detalhada para sua devida compreensão. Os sistemas com interações de longo alcance possuem características peculiares e bem distintas com relação aos sistemas com interação de curto alcance, tais como: inequivalência dos ensembles canônico e microcanônico, calor específico negativo, difusão anômala, estados quase estacionários não-gaussianos, entre outros [2]. São numerosos os exemplos que se enquadram nessa classe de sistemas físicos, dentre os quais podemos citar: sistemas autogravitantes [3], plasmas carregados [4], modelo Hamiltoniano de Campo Médio (HMF- Hamiltonian Mean Field) [5].

Neste trabalho abordamos os sistemas autogravitantes em uma e duas dimensões, além de outros sistemas para fins de comparação e enriquecimento de nossa análise. Exploramos características peculiares e intrínsecas dos sistemas de interações de longo alcance, com especial ênfase à inequivalência de ensembles e, sobretudo, a propriedade de ergodicidade.

Na análise da evolução temporal de um sistema inicialmente em um estado fora do equilíbrio, nota-se que ele passa por um processo de relaxação bastante rápido

que leva o sistema para um estado quase estacionário, no qual permanece por um período longo e evolui gradativa e lentamente para o equilíbrio gaussiano. Em certas situações o sistema pode evoluir em torno de um estado quase estacionário, com amplitude de oscilação na energia diminuindo com o tempo por um processo de amortecimento de Landau não-linear [6]. Esse tipo de relaxação foi estudado com maior riqueza de detalhes por Lynden-Bell em 1967 [7] (seguido por outros pesquisadores posteriormente [8], [9], [10], [11] e [12]), que a denominou relaxação violenta. Em seu trabalho o autor obtem o estado após a relaxação violenta a partir do estado inicial, estimando a ordem de grandeza do tempo de relaxação. Uma das conclusões obtidas é que sua teoria ainda não seria satisfatória por apresentar algumas falhas.

A Hipótese Ergódica começou a ser elaborada por Boltzmann (1844-1906), motivado pela Física teórica e Mecânica Estatística, Boltzmann desenvolveu, entre as décadas de 1860 e 1890, várias formas de sua Hipótese Ergódica até alcançar uma forma mais sofisticada para ela. A hipótese ergódica foi construída passando por todo um processo de desenvolvimento até que se consolidou como hoje é conhecida. Em 1868, Boltzmann obteve a distribuição de probabilidade para pontos no espaço de fase de um corpo quente, a qual hoje denominamos distribuição de probabilidade microcanônica [13]. Embora o fator fundamental para resolver e obter essa distribuição de probabilidade não tenha sido explicada ou sequer citada inicialmente por Boltzmann, foi, posteriormente, analisada e comentada por Maxwell, o qual afirmou que "a única pressuposição necessária para a prova direta da distribuição de probabilidade microcanônica de Boltzmann é que o sistema deixado no seu estado atual de movimento, cedo ou tarde, passará por todas as fases permitidas pela sua equação de energia". Essa interpretação de Maxwell acerca do trabalho de Boltzmann é basicamente o conceito da Hipótese Ergódica. Assim, objetivamente falando, se-

gundo a hipótese de ergodicidade de Boltzmann um sistema em evolução livre por um tempo suficientemente longo passa por todos os estados compatíveis com suas condições gerais para um determinado valor de energia [14], [15], o que ainda pode ser descrito como uma condição característica de um grande sistema de partículas interagentes entre si em equilíbrio em que a média temporal se aproxima da média do ensemble de partículas.

Para descrever a ergodicidade (ou a não-ergodicidade) dos sistemas físicos no presente trabalho utilizamos três métodos distintos. Primeiro consideramos a evolução temporal da dispersão (desvio padrão) da média temporal da velocidade de cada partícula do sistema. O sistema é considerado ergódico quando esse desvio padrão é nulo ou tende a zero depois de um tempo característico [16]. O segundo método consiste em determinar a estatística dos tempos de visitação de cada partícula em células no espaço dos momentos. A terceira abordagem para investigar a propriedade de ergodicidade em sistemas de longo alcance que utilizamos é o método do funcional dinâmico, o qual pode ser sucintamente descrito pela transformada de Fourier com o número de onda do processo estocástico  $Y(n)$ , com  $n$  sendo um número inteiro, em que se expressa a média do ensemble sobre as realizações de tal processo e se usa a definição de ergodicidade segundo a qual a média do ensemble e a média temporal são iguais. Mostramos que para os sistemas autogravitantes com o fator de Kac o sistema é sempre ergódico, embora seja necessário um tempo considerável para isso. No entanto, se o fator de Kac não for utilizado, então o tempo necessário para o sistema ser ergódico diverge com o crescimento de  $N$ , i. e. o sistema é estritamente não-ergódico somente no limite de  $N \rightarrow \infty$ .

No segundo capítulo introduzimos os primeiros conceitos relativos a sistemas com interações de longo alcance, descrevemos suas características e especificidades. Abordamos, no terceiro capítulo, a dinâmica do espaço de fase, especificamente são

---

descritas as ideias de espaço de fase, estado quase estacionário, relaxação violenta, Teorema de Liouville, Teorema do Virial, e sobretudo explicamos o conceito de ergodicidade e a descrevemos sob as três abordagens distintas: utilizando o método do desvio padrão das velocidades, a abordagem dos tempos de visitaç o e o m todo do funcional din mico. No cap tulo quatro discorremos a respeito dos modelos e m todos computacionais utilizados. No quinto cap tulo expomos os resultados obtidos para o modelo Hamiltoniano de Campo M dio, a fim de promover uma compara o com os demais sistemas, al m dos resultados para sistemas autogravitantes em uma dimens o, utilizando, inclusive, o m todo de soma de Ewald para as simula es e, tamb m, resultados para sistemas autogravitantes bidimensionais com simula es com integrador simpl tico de Yoshida [17], mostramos resultados referentes   constru o de Maxwell para o modelo do anel. Ent o, finalmente, no sexto cap tulo, apresentamos as conclus es e perspectivas para a  rea de pesquisa em quest o.

## 2 Primeiros Conceitos

Neste capítulo serão apresentados alguns conceitos essenciais à compreensão do trabalho realizado na presente tese. Serão introduzidos os principais conceitos pertinentes a sistemas com interações de longo alcance, bem como serão descritos alguns exemplos de sistemas que se enquadram nesta categoria e suas propriedades mais fundamentais para a abordagem desta tese.

### 2.1 Interações de longo alcance: Uma visão geral

O estudo de sistemas com interações de longo alcance é de grande relevância, dado que são frequentemente encontrados na natureza, tais como plasmas, sistemas autogravitantes, vórtices, entre outros [2]. Sistemas com interações de longo alcance possuem características que os distinguem claramente dos sistemas com interações de curto alcance. Um importante ponto a salientar é que, apesar de sua relevância, ainda existem problemas em aberto nessa área de pesquisa, por exemplo, ainda não existe uma teoria satisfatória para relaxação violenta nos referidos sistemas. É interessante também mencionar que sistemas de pequeno porte com interação de curto alcance podem apresentar propriedades típicas de sistemas com interações de longo alcance [2].

A evolução temporal dos sistemas com interações de longo alcance é peculiar quando comparada à dos sistemas de curto alcance. Em um primeiro momento eles

passam pelo processo de relaxação violenta, caracterizado por uma rápida evolução do estado inicial para um estado quase estacionário, tal processo foi e é amplamente abordado pela literatura, Lynden-Bell foi o pioneiro ao investigar e obter resultados de grande relevância para o tema, ele desenvolveu a primeira teoria para descrever o processo de relaxação violenta [7]. Sua proposta, no entanto, se mostrou limitada por não descrever satisfatoriamente resultados observacionais em Astrofísica [8] [7]. Algumas outras propostas se seguiram com a finalidade de superar essas limitações, tais como: Shu (1978), Stiavelli Bertin (1987), Spiegel e Hernquist (1992), Kull, Treumann e Bohringer (1997), Nakamura (2000) e Trenti e Bertin (2002) e Yan Levin (2008). Apesar de resultados interessantes obtidos, nenhuma dessas teorias é plenamente geral e satisfatória.

Em sistemas com interações de longo alcance o estado quase estacionário tem um tempo de vida que diverge com o número  $N$  de partículas. Para tempos suficientemente longos o sistema relaxa para o equilíbrio termodinâmico, e para  $N \rightarrow \infty$  o sistema permanece sempre no estado quase estacionário [4]. Assim, os limites  $N \rightarrow \infty$  e  $t \rightarrow \infty$  não comutam. Além disso, sistemas com interações de longo alcance não são aditivos [2]. Isso pode levar a importantes consequências, uma delas é a quebra de ergodicidade. Tais aspectos dos sistemas com interação de longo alcance mencionados serão devidamente discutidos nesta tese.

### 2.1.1 Exemplos de sistemas e modelos com interação de longo alcance

Muitos sistemas físicos na natureza possuem a característica de interação de longo alcance, o que justifica diversos comportamentos peculiares nesses sistemas que devem e precisam ser considerados. Em especial, citamos sistemas de partículas carregadas [4], sistemas autogravitantes [3], além do modelo Hamiltoniano de Campo

Médio (HMF- Hamiltonian Mean Field) [5], cujos aspectos essenciais explicitamos a seguir:

- **Sistemas de partículas carregadas**

Em um sistema com interação coulombiana, o potencial pode ser obtido através da equação de Poisson:

$$\nabla^2\phi = \rho, \quad (2.1)$$

em que  $\nabla^2$  designa o operador laplaciano,  $\phi$ , o potencial elétrico de interação entre as partículas e  $\rho$  é a densidade de carga no sistema. A equação de Poisson pode ser escrita na forma homogênea, caso em que é conhecida como equação de Laplace:

$$\nabla^2\phi = 0. \quad (2.2)$$

Usamos o método de solução da função de Green para resolver a equação de Poisson, sendo o laplaciano da função de Green dado por:

$$\nabla^2G = -\delta(r). \quad (2.3)$$

Relacionando as equações 2.1 e 2.3 e usando a Lei de Coulomb obtemos a função de Green como um múltiplo de  $\frac{1}{r}$ , e, conseqüentemente, obtemos  $V(r)$ , em 3D, proporcional a  $r^{-1}$ , em 2D proporcional a  $\ln r$  e em 1D proporcional a  $r$ , uma vez que o laplaciano para este caso pode ser escrito simplesmente como  $\frac{d^2V}{dr^2} = 0$ .

- **Sistemas autogravitantes** Esse tipo de interação pode ser analisado, por

exemplo, na dinâmica de galáxias. No presente trabalho, investigamos a propriedade de ergodicidade neste tipo de sistemas em 1D e 2D.

O potencial dos sistemas em apreço é obtido da equação de Poisson:

$$\nabla^2\Phi = \rho, \quad (2.4)$$

em que  $\nabla^2$  designa o operador laplaciano,  $\Phi$ , o potencial gravitacional de interação entre as partículas e  $\rho$  é a densidade de partículas no sistema. Para sistemas autogravitantes em 1 dimensão a solução da equação de Poisson nos dá um potencial  $V(r)$  múltiplo da distância interpartícula  $r$ , em 2D, a solução é múltipla de  $\ln r$  e, por fim, em 3D,  $V(r)$  é múltiplo de  $r^{-1}$ . O modelo gravitacional em 3 dimensões descreve o movimento de massas pontuais, enquanto em 2 dimensões tem-se massas em fios paralelos e, em 1 dimensão, o modelo descreve folhas paralelas ao longo da direção perpendicular às folhas. Para 1D o modelo é o mais simples e possibilita uma boa investigação de sistemas autogravitantes, além do tempo para simular tal modelo, por ser mais simples, ser menor que para as demais dimensões.

- **Modelo de Hamiltoniana de Campo Médio- HMF**

O modelo HMF é frequentemente abordado na literatura, cujas propriedades podem ser analiticamente descritas. Ele é formado por  $N$  partículas em um círculo que constituem um sistema cuja Hamiltoniana é dada por [18]:

$$H = \sum_{k=1}^N \frac{p_k^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{k,l=1}^N [1 - \cos(\theta_k - \theta_l)], \quad (2.5)$$

em que  $\theta_k$  é a posição angular da partícula  $k$  e  $p_k$  é seu momento conjugado. Tal sistema pode ser visto como a composição de  $N$  rotores clássicos acoplados com momento de inércia unitário [19].

Sistemas hamiltonianos clássicos com interações de longo alcance para o limite

$N \rightarrow \infty$  possuem função de distribuição de uma partícula que satisfaz a equação de campo médio de Vlasov [20]. Portanto, podemos apenas analisar a dinâmica de uma única partícula em evolução no campo médio das partículas remanescentes. Deste modo, os estados quase estacionários correspondem ao número infinito de estados estacionários estáveis da equação de Vlasov. Sendo  $N$  finito, para que seja satisfeita a mesma circunstância de estado quase estacionário, devem ser feitas pequenas correções.

## 2.2 Propriedades dos sistemas de interação de longo alcance

Vamos agora discutir algumas importantes características que ocorrem em sistemas com interação de longo alcance, as quais constituem fatores relevantes que os distinguem dos sistemas de interação de curto alcance e são determinantes na análise dos fenômenos que ocorrem em sua dinâmica.

### 2.2.1 Não-aditividade e extensividade

- Extensividade

Essa propriedade é determinada, em vários sistemas de interações de longo alcance, pelo fator  $\frac{1}{N}$ [2] em suas Hamiltonianas, esse termo é conhecido como fator de Kac, de notória relevância nas análises do presente trabalho. Tal fator torna a energia proporcional a  $N$ , essa reescala de energia e também da entropia constituem importante aspecto de transição de fase. Assim, a propriedade de extensividade ocorre em sistemas em que as variáveis termodinâmicas são dependentes do tamanho do sistema, neste caso o sistema é denominado *extensivo*.

- Aditividade

Para sistemas com interação de longo alcance, se dividirmos o sistema em duas partes, dois subsistemas separados, a energia total do sistema não será igual à soma das energias dos dois subsistemas [2]. Em sistemas com interação de curto alcance, a interação de interface entre os dois subsistemas aumenta em função da superfície, a energia total de cada subsistema cresce proporcionalmente ao volume, o que, no limite termodinâmico, faz com que o termo de interface possa ser ignorado. Por sua vez, em sistemas com interação de longo alcance, o termo de interface considera a totalidade de partículas, o que o leva a também crescer com o volume, deste modo, para este caso, a interação de interface não pode ser negligenciada, ou seja, esses sistemas possuem a característica da não aditividade. Assim, se o sistema for dividido em dois subsistemas, a energia total  $E$  não será igual à simples adição das respectivas energias  $E_1$  e  $E_2$  de cada subsistema.

Deste modo, todo sistema aditivo é extensivo, a recíproca, no entanto, não necessariamente é verdadeira. A não-aditividade de sistemas com interação de longo alcance constitui uma característica importante dos referidos sistemas e levam a consequências relevantes ligadas às outras propriedades tratadas neste trabalho.

### 2.2.2 Calor específico negativo

A questão do calor específico negativo é bem conhecida no contexto da Astrofísica [21], uma vez que se sabe que quando uma estrela ou um conjunto delas perde energia sua temperatura aumenta de acordo com o teorema do virial. O mesmo acontece com buracos negros, como demonstrado por Beckstein e Hawking em 1974 [21] como consequência do teorema do virial e foi abordada e discutida por Maxwell [22], Thirring [23] e Lynden-Bell [24], entre outros. À primeira vista isso seria um

paradoxo, já que um resultado bem conhecido em Mecânica Estatística é que o calor específico deve ser sempre positivo. De fato, assim o é se consideramos um sistema extensivo uniforme e dividido em partes de modo que o calor possa fluir entre elas. A segunda lei da termodinâmica afirma que o calor flui da parte mais quente para a mais fria, levando a um gradiente de temperatura. Se o calor específico for negativo a diferença de temperatura aumenta, gerando conseqüentemente um aumento também do fluxo de calor, impossibilitando que o sistema atinja o equilíbrio termodinâmico. A positividade do calor específico é assim uma condição de estabilidade do sistema. No entanto, é importante notar aqui que esse argumento somente é sólido se o sistema for aditivo, o que não é o caso dos sistemas aqui considerados, uma vez que sistemas com interações de longo alcance têm como característica a não-aditividade conforme explicado na seção de Propriedades dos Sistemas com interação de longo alcance. De fato, se considerarmos um sistema descrito pelo ensemble canônico de Gibbs, sua energia interna, considerando níveis de energia  $E_i$  é dada por

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_i E_i e^{-\beta E_i}}{Z} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}, \quad (2.6)$$

sendo  $Z$  a função de partição e  $\beta$  o inverso da temperatura. O calor específico é sempre positivo, pois

$$C_v = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial t} \propto \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle > 0, \quad (2.7)$$

em que  $C_v$  é o calor específico,  $E$  é a energia do sistema e  $t$ , a temperatura. No entanto, o teorema do virial para um sistema autogravitante nos dá [25]:

$$2 \langle T \rangle + \langle V \rangle = 0, \quad (2.8)$$

em que  $\langle T \rangle$  e  $\langle V \rangle$  são as médias estatísticas das energia cinética e potencial, respectivamente, para uma distribuição de posições e velocidades estacionária. Temos

então que:

$$E = \langle T \rangle + \langle V \rangle = - \langle T \rangle, \quad (2.9)$$

e portanto:

$$C_v = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial t} \propto \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} < 0. \quad (2.10)$$

Assim, a eq. (2.10) mostra o calor específico negativo para o ensemble microcanônico, o que significa que ao aumentar sua energia, a temperatura do sistema cai e vice-versa, ratificando, tal paradoxo não violar a Segunda Lei da Termodinâmica  $dS = \frac{dQ}{T} \geq 0$  pode ser explicado pelo fato de que para sistemas cujas forças dominantes são gravitacionais, como corpos em órbita, com aumento da energia a velocidade do sistema é reduzida e, conseqüentemente, sua temperatura também o é, além disso, o argumento que vai de encontro ao calor específico negativo o faz ao pressupor a aditividade do sistema [26], o que não ocorre em sistemas com interações de longo alcance. Apesar de (2.7) e (2.10) aparentarem uma contradição, salientamos que ela ocorre porque estamos aplicando a teoria a diferentes ensembles, ao canônico e ao microcanônico, com vínculos físicos distintos em cada caso.

Além do contexto astrofísico, existem também outras circunstâncias que implicam calor específico negativo em sistemas com interações de longo alcance. Há evidência experimental do calor específico negativo microcanônico para sistemas pequenos [25]. Um deles é a fragmentação nuclear, em que foram feitas medidas consecutivas durante a colisão entre átomos de Au [27].

### 2.2.3 Inequivalência de ensembles estatísticos

Alguns sistemas com interações de longo alcance podem apresentar inequivalências entre os ensembles microcanônico e o canônico, característica não detectada em sistemas com interações de curto alcance. Alguns exemplos são as interações gravitacionais, cuja inequivalência de ensembles pode ser obtida considerando o teorema do Virial, cuja forma escalar é dada por  $2T + V = 0$  [25], em que  $T$  representa a média estatística da energia cinética do sistema e  $V$  sua média estatística da energia potencial. Um outro exemplo é o modelo BEG (Blume-Emery-Griffiths) como discutido por **Barré** [28], que analisou os diagramas de fase do modelo nos ensembles canônico e microcanônico. No modelo BEG- spin 1 o ensemble canônico exibiu um diagrama de fase com uma transição contínua no ponto crítico, enquanto que no ensemble microcanônico o sistema possuía calor específico negativo e um salto na temperatura.

Desses exemplos vemos que as descrições de ensemble microcanônico e de ensemble canônico podem ser distintas para alguns sistemas. Os dois ensembles correspondem a diferentes vínculos físicos sobre o sistema, energia ou temperatura constantes, o que pode levar a diferentes propriedades físicas. Gibbs notou, em 1902, que os dois ensembles, que são descrições distintas, levam a previsões no limite termodinâmico que podem ser equivalentes ou inequivalentes [29], [30]. Muitos outros trabalhos posteriores revelaram o mesmo comportamento em sistemas de muitos corpos [30], [31]. A equivalência ou não dos dois ensembles depende do tipo de interação presente no sistema em análise.

Desde a década de 1960, pesquisadores como Lynden-Bell e Wood, por exemplo, já começaram a verificar exemplos de sistemas analisados sob o olhar da Mecânica Estatística em que as propriedades do ensemble microcanônico eram diferentes do comportamento no caso da descrição canônica [31].

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

$$s(E) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \Omega(E), \quad (2.11)$$

em que  $\Omega(E)$  é a densidade de microestados com energia interna por partícula  $E$ , apresenta um ou mais intervalos não-côncavos que fazem  $s'$ , a primeira derivada de  $s(E)$ , uma função não-monotônica de  $E$ . Sendo  $s(E)$  não-côncava em todo seu domínio, tal função não pode ser descrita como a transformada de Legendre da energia livre, função termodinâmica do ensemble canônico:

$$\varphi(\beta) = \lim_{n \rightarrow \infty} -\frac{1}{n} \ln Z(\beta), \quad (2.12)$$

na qual  $Z(\beta)$  é a função de partição do inverso da temperatura  $\beta = \frac{ds}{dE}$ . Por outro lado, se  $s'$  existir para todo  $E$  e for monotônica,  $s$  é então a transformada de Legendre de  $\varphi(\beta)$ :

$$s(E) = \beta(E)E - \varphi(\beta(E)), \quad (2.13)$$

ou, ainda,

$$\varphi(\beta(E)) = \beta(E)E - s(E), \quad (2.14)$$

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

Aprofundaremos na discussão da inequivalência de ensembles e calor específico negativo na seção Construção de Maxwell em sistemas de interação de longo alcance - O caso do modelo do anel.

### 3 Dinâmica de Sistemas de muitos corpos com interações de longo alcance

No presente capítulo discutiremos o que é um Estado Quase Estacionário, a teoria de Relaxação Violenta de Lyndenn Bell permeada pelas teorias adjacentes, os teoremas que descrevem a dinâmica no espaço de fase, como o Teorema do Virial e o Teorema de Liouville, além de levantar a questão de *mixing* e Ergodicidade, explicando o contexto histórico de desenvolvimento da Hipótese Ergódica e aspectos a ela pertinentes para, em seguida, descrever os três métodos de análise da propriedade de ergodicidade usados no desenvolvimento desta tese.

#### 3.1 Espaço de Fase

O espaço de fase  $\Gamma$  de um sistema com  $n$  graus de liberdade trata-se do espaço cujas coordenadas são o momento  $p$  e a posição  $r$  em  $2n$  dimensões [32].

Para tal sistema com  $N$  partículas, considerando sua massa  $m = 1$ , temos sua Hamiltoniana dada pela equação:

$$H = T + V, \tag{3.1}$$

em que  $T$  é a energia cinética e  $V$ , a potencial. Tal equação pode ser escrita mais

detalhadamente como:

$$H = \sum_{k=1}^N \frac{p_k^2}{2} + \sum_{k,l=1}^N V_k(r_i - r_j), \quad (3.2)$$

em que  $p_k$  e  $V_k$  constituem o potencial e a posição, respectivamente, da  $k$  - ésima partícula do sistema em questão.

## 3.2 Estado quase estacionário - QSS

Estados quase estacionários(QSS-do inglês *quasi-stationary states*) são estados dinâmicos nos quais o sistema apresenta características de equilíbrio, no entanto não corresponde ao equilíbrio previsto pela mecânica estatística em virtude de alguns aspectos, dentre os quais podemos destacar que as quantidades macroscópicas do sistema não obedecem à previsão da mecânica estatística. Uma variável macroscópica do sistema pode sofrer, eventualmente, uma alteração que aconteceria em um tempo que aumenta com o crescimento do número de partículas envolvidas.

Existem alguns trabalhos com simulações numéricas que mostram esses aspectos [33]. A duração temporal do estado quase estacionário pode ser bem longa e por isso é importante compreender os aspectos desse estado. A equação de Vlasov é uma ferramenta importante nesse sentido, uma vez que possibilita uma descrição teórica dos estados quase estacionários e o elemento temporal é discutido e analisado em comparação com simulações numéricas. Deste modo, Lynden-Bell [7] desenvolveu sua teoria de relaxação violenta, na qual faz uso da equação de Vlasov, cujas características possibilitam prever o estado quase estacionário para o modelo HMF.

### 3.3 Relaxação Violenta em sistemas com interações de longo alcance

Sistemas de muitas partículas com forças de longo alcance que inicialmente não estão no estado de equilíbrio usualmente oscilam inicialmente com amplitude decrescente podendo alcançar um estado quase estacionário, conforme ilustra o esquema da Figura 1.

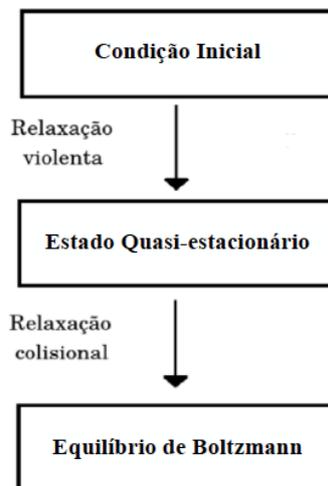


Figura 1: Esquema de evolução de um sistema com interação de longo alcance passando pela relaxação violenta.

O tempo necessário para alcançar esse estado foi estimado por Lynden-Bell como sendo da ordem de algumas oscilações, ou seja, bastante curto em sistemas estelares, tal aspecto justifica o uso, portanto, do termo relaxação violenta. Ele discute que em uma galáxia cujo campo gravitacional médio não é estável e relaxa para o quase equilíbrio se aplica a seguinte expressão para o tempo de relaxação violenta:

$$T_r \approx \frac{3P^*}{8\pi}, \quad (3.3)$$

em que  $P^* = 2\pi/n$  é a frequência de vibração da galáxia e:

$$n = (2\pi G\bar{\rho})^{-1/2}, \quad (3.4)$$

na qual  $\bar{\rho}$  é a densidade média dada por  $\bar{\rho} = M/(\frac{4}{3}\pi R_0^3)$ .

Um dos problemas apontados na teoria de Lynden-Bell é sua não-transitividade, como foi colocado pelo próprio Lynden-Bell e Arad [34]. Além disso, a relaxação violenta quase nunca é completa, flutuações do potencial gravitacional morrem rapidamente antes que o sistema chegue ao estado mais provável, que seria o estado quase estacionário. Um aspecto importante também nesta teoria a ser discutido é o fato de pressupor um estado de *mixing* completo, assim, segundo ela o critério de ergodicidade já é obedecido como pressuposto.

Posteriormente ao trabalho de Lynden-Bell [7], prevendo superar suas falhas, foram propostas outras teorias. É possível, basicamente, dividir essas teorias em dois grupos: um deles é baseado numa aproximação mais fundamental do problema, a qual trabalha com a maximização da entropia, o outro tem um perfil mais heurístico. No primeiro grupo estão as teorias de Lynden-Bell e Nakamura [8], as duas últimas são bastante semelhantes entre si. No segundo grupo estão Shu [9] Stiavelli e Bertin [10], Tremann e Böhringer [11], Trenti e Bertin [12]. Nenhuma delas se mostrou plenamente satisfatória e a teoria de Lynden-Bell ainda constitui uma boa aproximação em muitas situações.

Todas essas teorias têm como objetivo prever o estado final após a relaxação violenta a partir do estado inicial. A dinâmica é descrita de maneira exata pela equação de Vlasov [20], [35]:

$$\partial_t f + v \cdot \partial_r f - \nabla \Phi \cdot \partial_v f = 0, \quad (3.5)$$

em que  $f = f(r, v, t)$ , a função de densidade de probabilidade (DF) reduzida a uma

partícula no espaço de fase e  $\Phi(r, t)$  o potencial de campo médio:

$$\Phi(r, t) = \int v(r - r') f(p', r', t) dp' dr' \quad (3.6)$$

na qual  $v(r - r')$  é o potencial de interação de pares entre duas partículas em  $r$  e  $r'$ .

No caso gravitacional  $\Phi$  satisfaz a equação de Poisson:

$$\nabla^2 \Phi(r, t) = 4\pi G \int f(r, v, t) d^3v. \quad (3.7)$$

Em seu artigo original Lynden-Bell leva em conta o aspecto de incompressibilidade de células no espaço de fase, abraçando uma hipótese ergódica na dinâmica, que permite, pela maximização da entropia associada, determinar o estado estacionário da equação de Vlasov ao final da relaxação violenta.

A fim de corrigir falhas na teoria de Lynden-Bell, Nakamura propôs uma nova teoria para a relaxação violenta. A diferença entre as duas teorias reside, sobretudo, nas suas definições de entropia e na discretização do espaço de fase. Enquanto que na teoria de Lynden-Bell o espaço de fase é discretizado considerando elementos de *igual volume*, na teoria de Nakamura a discretização se dá pelo uso de elementos de *massas iguais*. A questão da discretização por *igual volume* versus *massas iguais* reside no fato de que em Lynden-Bell a probabilidade de se encontrar inicialmente uma determinada partícula numa dada célula é proporcional ao volume da tal célula, por outro lado, no trabalho de Nakamura ela é proporcional à massa da célula.

Um problema apresentado por ambas as teorias é sua natureza não-transitiva, mostrada por Arad e Lynden-Bell [34], que considera um sistema gravitante em um estado fora do equilíbrio, com energia inicial  $E_1$ , que relaxa até um primeiro estado  $s_1$ . Então o sistema é perturbado por uma força externa que induz uma variação de energia  $\Delta E$ . O sistema então sofre uma nova relaxação violenta, desta vez para um

estado  $s_2$  com energia  $E_2$ . Considerando o mesmo sistema com as mesmas condições mas com uma energia inicial  $E + \Delta E$  que relaxa apenas uma vez para um estado  $s_3$ , que foi mostrado ser diferente de  $s_2$ .

A não-transitividade é sinal de que a descrição cinética da relaxação violenta é, provavelmente, incompleta assim como o equilíbrio é independente do caminho de evolução do sistema. É necessário, então, uma abordagem dinâmica para encontrar uma teoria apropriada para determinar a função grão-grosso da densidade do espaço de fase.

### 3.4 Teorema do Virial

O Teorema do Virial possibilita estabelecer uma relação direta entre energia cinética e energia potencial e é amplamente utilizado em mecânica estatística. O termo "virial" tem origem do latim, da palavra *viris*, a qual significa forte, enérgico. O pioneiro no uso desse termo foi o físico, com trabalhos de grande notoriedade na área da Termodinâmica, Rudolph Julius Emmanuel Clausius (1822-1888) [36].

Para um sistema de partículas temos o vetor momento  $\mathbf{p}_n$  da  $n$ -ésima partícula e o vetor posição  $\mathbf{r}_n$ . Define-se, então, a grandeza  $S$ , a qual pode ser descrita pela equação:

$$S = \sum_n \mathbf{p}_n \cdot \mathbf{r}_n. \quad (3.8)$$

A derivada temporal de  $S$  é escrita, portanto, como:

$$\frac{dS}{dt} = \sum_n (\dot{\mathbf{p}}_n \cdot \mathbf{r}_n + \mathbf{p}_n \cdot \dot{\mathbf{r}}_n), \quad (3.9)$$

cuja média sobre um intervalo de tempo  $\tau$  é dada por:

$$\left\langle \frac{dS}{dt} \right\rangle = \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} \frac{dS}{dt} dt. \quad (3.10)$$

Se considerarmos o movimento do sistema em questão como periódico e o intervalo de tempo  $\tau$  como um múltiplo inteiro do período pertinente ao sistema, notamos que a média temporal da derivada  $\frac{dS}{dt}$  vai a zero. Ou, ainda, no caso de o sistema não ser periódico, podemos escolher  $\tau$  suficientemente grande de tal modo que também tenhamos  $\left\langle \frac{dS}{dt} \right\rangle = 0$ . Assim sendo, escrevemos:

$$\langle \dot{S} \rangle = 0, \quad (3.11)$$

o que nos conduz a:

$$\left\langle \sum_n (\dot{\mathbf{p}}_n \cdot \mathbf{r}_n) \right\rangle = - \left\langle \sum_n (\mathbf{p}_n \cdot \dot{\mathbf{r}}_n) \right\rangle. \quad (3.12)$$

Uma vez que  $\dot{\mathbf{p}}_n$  é igual a  $\mathbf{F}_n$  e  $\mathbf{p}_n \cdot \dot{\mathbf{r}}_n$  pode ser escrito como duas vezes a energia cinética, temos:

$$\left\langle \sum_n (\mathbf{F}_n \cdot \mathbf{r}_n) \right\rangle = - \left\langle 2 \sum_n T_n \right\rangle. \quad (3.13)$$

Assim, escrevendo em função da energia cinética total do sistema  $T$ , obtemos o resultado generalizado:

$$\langle T \rangle = \frac{-1}{2} \left\langle \sum_n (\mathbf{F}_n \cdot \mathbf{r}_n) \right\rangle \quad (3.14)$$

Deste modo, foi enunciado por Clausius o Teorema do Virial, segundo o qual a média da energia cinética de um sistema é igual ao seu virial, uma vez que virial é

a segunda parte da equação (3.14). Dado que as forças  $F_n$  podem ser escritas em função do gradiente do potencial  $\nabla V_n$ ,  $F_n = -\nabla V_n$ , é possível escrever a equação 3.14 como:

$$\langle T \rangle = \frac{1}{2} \left\langle \sum_n (\mathbf{r}_n \cdot \nabla V_n) \right\rangle. \quad (3.15)$$

Considerando uma força como a lei de potencial  $\mathbf{F}_n \propto r^k$ , o potencial  $V_n$  será dado pela função:

$$V_n = Cr^{(k+1)}, \quad (3.16)$$

em que  $C$  é um valor constante. Assim:

$$\mathbf{r}_n \cdot \nabla V_n = (k+1)V_n, \quad (3.17)$$

o que permite escrever o teorema do virial como:

$$\langle T \rangle = \frac{k+1}{2} \langle V \rangle. \quad (3.18)$$

O valor de  $k$  depende do tipo de sistema em questão. Para sistemas com interação gravitacional em três dimensões, por exemplo,  $k = -2$ , temos:

$$\langle T \rangle = \frac{-1}{2} \langle V \rangle. \quad (3.19)$$

Para sistemas autogravitantes em uma dimensão  $k = 0$  [37]. Temos, então:

$$\langle T \rangle = \frac{1}{2} \langle V \rangle. \quad (3.20)$$

## 3.5 Teorema de Liouville

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

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad (3.21)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \quad (3.22)$$

Com

$$H(p, q) = \sum_{\alpha=1}^N \frac{p_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + V(q_1, \dots, q_{3N}), \quad (3.23)$$

em que  $m_{\alpha}$  é a massa da partícula  $\alpha$ ,  $p_{\alpha}$  e  $q_{\alpha}$  são seus momentos e coordenadas, respectivamente, e  $V$  é a energia potencial total do sistema.

As equações de movimento são assim escritas como:

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p_{\alpha}}{m_{\alpha}} \quad (3.24)$$

e

$$\dot{p}_{\alpha} = -\frac{\partial H}{\partial q_{\alpha}} = -\frac{\partial V}{\partial q_{\alpha}} = f_{\alpha}(q_1, \dots, q_{3N}) \quad (3.25)$$

na qual  $f_{\alpha}$  é a força atuante na partícula  $\alpha$ .

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

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

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \sum_{\alpha=1}^{3N} \left[ \frac{\partial(\rho \dot{q})}{\partial q} + \frac{\partial(\rho \dot{p})}{\partial p} \right] = - \sum_{\alpha=1}^{3N} \left[ \frac{\partial \rho}{\partial q} \dot{q} + \rho \frac{\partial \dot{q}}{\partial q} + \frac{\partial \rho}{\partial p} \dot{p} + \rho \frac{\partial \dot{p}}{\partial p} \right] \quad (3.26)$$

Usando as equações de Hamilton chegamos a:

$$\frac{\partial \dot{q}}{\partial q} = \frac{\partial(\partial H / \partial p)}{\partial q} = \frac{\partial^2 H}{\partial p \partial q} = \frac{\partial^2 H}{\partial q \partial p}, \quad (3.27)$$

e

$$\frac{\partial \dot{p}}{\partial p} = \frac{\partial(\partial H / \partial q)}{\partial p} = - \frac{\partial^2 H}{\partial p^2}. \quad (3.28)$$

Obtemos, finalmente, a equação de Liouville:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{\alpha=1}^{3N} \frac{\partial \rho}{\partial q} \dot{q} + \frac{\partial \rho}{\partial p} \dot{p} = 0, \quad (3.29)$$

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

Podemos também demonstrar o teorema de Liouville pelo caminho utilizado no livro [38]. Definimos o volume  $V_D$  de uma região  $D \in R^{2n}$  no espaço de fase como:

$$V_D = \int_D d^{2n} \omega. \quad (3.30)$$

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

$$V'_D = \int_{D'} d^{2n}\omega = \int_D |J| d^{2n}\omega, \quad (3.31)$$

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

$$J = \pm 1, \quad (3.32)$$

para uma transformação canônica qualquer. Substituindo (3.32) em (3.31) obtemos:

$$V_D = V'_D, \quad (3.33)$$

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

## 3.6 Ergodicidade

Boltzmann (1844-1906), motivado pela Física teórica e Mecânica Estatística desenvolveu, entre as décadas de 1860 e 1890, várias formas de sua Hipótese Ergódica até alcançar uma forma mais sofisticada para ela e próxima de como a conhecemos atualmente. O termo "Ergódica" foi escolhido por Boltzmann para sua hipótese em decorrência do termo em grego para a palavra trabalho, algo próximo de "ergasia". É interessante conhecer e analisar o desenvolvimento do processo até chegar de fato na hipótese ergódica. Em 1868, ele obteve a distribuição de probabilidade para pontos no espaço de fase de um corpo quente, que hoje denominamos microcanônica [13]. O fundamental para resolver e obter essa distribuição de probabilidade não foi,

a princípio, citada ou explicada por Boltzmann. No entanto, foi, posteriormente, comentada por Maxwell, o qual afirmou que "a única pressuposição necessária para a prova direta da distribuição de probabilidade microcanônica de Boltzmann é que o sistema deixado no seu estado atual de movimento, cedo ou tarde, passará por todas as fases permitidas pela sua equação de energia. Essa interpretação de Maxwell acerca do trabalho de Boltzmann é basicamente o conceito hoje conhecido da Hipótese Ergódica.

Devemos distinguir a Hipótese Ergódica de outra hipótese similar que é mencionada por Boltzmann para gás rarefeito por volta do ano de 1870 [13] em um trabalho sobre o movimento interno de átomos em moléculas de gás, segundo o qual é evidenciado que várias moléculas de gás passarão por todos os estados de movimento possíveis, tal característica é devida às diversas colisões entre as diferentes moléculas, o movimento em questão é visto como não periódico, estocástico, fatos que fazem com que o estado de uma única molécula assuma todas as configurações possíveis numa escala de tempo menor que qualquer outro evento global. Boltzmann também mostrou que essa segunda hipótese, a que se refere ao gás rarefeito, implica distribuição canônica para os estados das moléculas, por outro lado, por sua vez, a hipótese ergódica implica distribuição microcanônica para todo o corpo quente.

Assim, Boltzmann, se aproximando da citada interpretação de Maxwell acerca de seu trabalho de 1868, explica de forma mais precisa que a partir das equações nele obtidas é possível, sob uma suposição que não parece ser uma aplicação improvável para o corpo quente, alcança diretamente o equilíbrio térmico de uma molécula poliatômica e, de modo mais geral, de uma dada molécula que interage com uma massa de gás. O intenso aspecto caótico do movimento térmico e a variabilidade da força externa sobre os corpos envolvidos torna provável que os átomos entrem em movimento, que chamamos calor, de modo que todas posições e velocidades

compatíveis com a equação da conservação de energia sejam possíveis, esse aspecto é pressuposto da Hipótese Ergódica.

Então, neste trabalho de Boltzmann implica que, uma vez que o movimento da partícula visita todo o espaço de fase, as frequências de visita nessas regiões podem ser descritas por uma função densidade que deve ser invariante ao longo da evolução temporal. Para a distribuição microcanônica é possível aplicar este raciocínio para o sistema inteiro, para a distribuição canônica, por sua vez, é observado para moléculas individuais.

A visão de que a distribuição de equilíbrio deve ser representada pela densidade no espaço de fase positiva para todas configurações compatíveis com a conservação de energia não demanda a intervenção de forças externas. Nos trabalhos seguintes de Boltzmann ele aborda esse aspecto com clareza e discute um exemplo em que ele não concebe ainda a possibilidade de existência de outras distribuições de probabilidade com densidade positiva na região do espaço de fase permitida pelos valores de outras constantes de movimento, além da energia [?].

No entanto, em trabalhos posteriores [?], é possível perceber que Boltzmann aborda a possibilidade de a dependência da densidade em relação apenas à energia ser considerada uma questão aberta, além de adicionar a ausência de colisões múltiplas ou de outras constantes de movimento às condições de movimento.

Boltzmann considera em seus três artigos de 1871 [?], [?], [?] a equipartição sem que sejam usadas equações de movimento para sua obtenção, exceto pelas leis de conservação envolvidas nas colisões de dois corpos ou por uma representação discreta de estados dos átomos, classificados por valores discretos das possíveis posições e energia cinética, as quais são determinadas pela partição de todo o espaço de fase em células em formato de paralelepípedo. Tal distribuição é interessante, uma vez que possibilita que a probabilidade de estados seja calculada via análise combinatória.

Ainda assim, a dinâmica é intimamente ligada aos cálculos das medidas uma vez que a probabilidade de encontrar uma configuração microscópica é identificada como uma fração do tempo, que ao longo da evolução é o intervalo de tempo em que uma parte do sistema permanece em uma determinada célula do espaço de fase, isso implica o fato de que um ponto do espaço de fase representando o sistema visita ciclicamente todas as células discretas da divisão do espaço de fase. Tal fato é a plena e completa interpretação da Hipótese Ergódica.

É importante salientar, uma vez que a literatura comumente não o faz, que a divisão do espaço de fase foi feita em células em formato de paralelepípedo (de modo tal que tais células sejam de  $3N$  dimensões no espaço das posições por  $3N$  dimensões no espaço dos momentos). Assim, as taxas e somas devem ser interpretadas como derivadas e integrais comuns, por isso a discretização do espaço de fase deve ser feita em forma de "grades" regulares.

Tal tipo de discretização, em células em forma de paralelepípedo, é uma exemplo de discretização que possibilita a descrição dos fenômenos da natureza via equações diferenciais coerentes com o sistema em questão. Por outro lado, se a discretização for feita de forma irregular, como fractais, por exemplo, as leis da natureza devem ser diferentes, necessitando, por exemplo, de derivadas fractais, sendo, portanto, as distribuições de Gibbs distintas em relação à discretizações regulares.

Esse aspecto constitui um ponto chave na abordagem de não-equilíbrio em que o análogo da distribuição microcanônica em sistemas dissipativos é determinado para a unificação entre equilíbrio e não-equilíbrio.

Assim, segundo a hipótese de ergodicidade de Boltzmann um sistema em evolução livre por um tempo suficientemente longo passa por todos os estados compatíveis com suas condições gerais para um determinado valor de energia [14], [15], o que ainda pode ser descrito como uma condição característica de um grande sistema

de partículas interagentes em equilíbrio em que a média temporal se aproxima da média do ensemble de partículas.

A hipótese ergódica tem papel fundamental nos trabalhos de J. Willard Gibbs sobre ensembles estatísticos, importância tal que a referida hipótese ganhou relevância e notoriedade no meio científico, sobretudo em virtude das pesquisas de Gibbs em 1902. Esse trabalho possibilitou relacionar de forma simples um conjunto teórico de determinadas quantidades, como a média de uma função, por exemplo, com uma quantidade definida no sistema, isto é, a média de tempo infinito de uma quantidade física. Portanto, a hipótese ergódica proporciona um caminho direto e imediato de justificar e dar significado físico ao método de ensembles estatísticos. A hipótese ergódica, além de tudo, traz consigo relevantes consequências, dentre as quais é interessante destacar e descrever as seguintes:

- O tempo médio que um sistema passa numa região do espaço de fase é proporcional à medida da própria região;
- Existe uma, e somente uma, distribuição de probabilidade que é invariante no que diz respeito às transformações pertinentes ao sistema.

Com o trabalho de Gibbs e o subsequente de P. e T. Ehrenfest [39] a hipótese ergódica ganhou posição central na Mecânica Estatística, no entanto, em 1913 Plancherel e Rosenthal [40] provaram que uma trajetória sob a hipótese de ergodicidade que varre todo o espaço de fase, passando por qualquer ponto desse espaço não poderia ser classificada como uma trajetória mecânica. Por essa razão, houve uma primeira tentativa de modo a evitar o problema, que era substituir a hipótese ergódica "forte" como descrita anteriormente por uma versão fraca, a chamada hipótese de quase ergodicidade: no longo prazo, uma trajetória do sistema passará próxima de qualquer ponto do espaço de fase, deste modo a trajetória será densa

no espaço de fase, mas esta tentativa não funcionou, sobretudo em virtude de dois motivos: Em primeiro lugar existia a dificuldade de se provar que um dado sistema era quase ergódico, um problema que se mostrou intratável. Em segundo lugar, mais tarde, tornou-se evidente que, à luz dos resultados obtidos através da abordagem finalmente bem sucedida para a teoria ergódica, que quase ergodicidade ainda que provável seria insuficiente para se obter o resultado desejado, pois pode ser constatado, por exemplo, que sistemas quase ergódicos não apresentam igualdade entre a média temporal e a média do ensemble. Por esse motivo, por um longo tempo, houve ceticismo generalizado sobre a hipótese ergódica e sua descrição pela mecânica estatística.

Na década de 1930 foi desenvolvida uma nova abordagem por Birkhoff, Koopman e von Neumann [14], foi originada, então, a denominada Teoria Ergódica, a partir do teorema ergódico de Birkhoff [41], em que se estabelecia que o tempo médio que um sistema passa em uma região do espaço de fase é proporcional à medida dessa região. Birkhoff [41] ainda nessa década propôs que os resultados do problema ergódico podem ser obtidos mostrando a igualdade entre as médias no espaço de fase e as médias em um intervalo de tempo infinito usando apenas propriedades dinâmicas do sistema e suposições de sua teoria de ergodicidade.

A teoria ergódica é diferente da hipótese ergódica, a primeira caracteriza a ergodicidade de um sistema físico por seus aspectos dinâmicos, sem se pautar na hipótese ergódica. Deste modo, ao longo do tempo, a teoria ergódica foi ganhando mais riqueza em seus aspectos matemáticos e da dinâmica, se consolidando na Física Teórica.

Definimos um fluxo no espaço de fase por uma transformação, na qual todo

ponto  $x$  é transformado em outro ponto  $x_t$  pelo operador  $T(t)$ :

$$x \rightarrow x_t = T(t)x. \quad (3.34)$$

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

$$b(x) \rightarrow Tb(x) \equiv b(x_t) = b(T(t)x). \quad (3.35)$$

As transformações  $T(t)$  em termos do parâmetro  $t$  formam um grupo [42]. Pode-se considerar fluxos mais gerais, não necessariamente descritos por uma Hamiltoniana. No entanto, sempre se mantem uma característica que é comum aos sistemas hamiltonianos: a existência de medidas preservadas. Essa temática tem sido desenvolvida com o campo da matemática, incluindo a teoria espectral, análise funcional e a topologia, recebendo a denominação *Teoria Ergódica* ou *Dinâmica Geral* [42].

Sob a ação do fluxo  $T(t)$  uma dada trajetória limitada no espaço de fase cruza infinitas vezes um dado domínio para  $t \rightarrow \infty$ . Consideramos uma função dinâmica  $b(x)$  integrável no espaço de fase:

$$\int d\mu_0 |b(x)| < \infty, \quad (3.36)$$

em que  $\mu_0$  é uma medida invariante nesse espaço. Se a média temporal de  $b(x)$  for igual à média sobre a região acessível do espaço de fase, o sistema é ergódico:

$$\lim_{t_f \rightarrow \infty} \frac{1}{t_f - t_0} \int_{t_0}^{t_f} dt b(x_t) = \bar{b}(x). \quad (3.37)$$

Esse resultado independe do limite inferior de integração [41]. Esse teorema de Birkhoff vale para toda função  $b(x_t)$  como descrita exceto para para um conjunto de medida zero.

Vemos então que, em um sistema ergódico, as médias temporais são iguais às

médias microcanônicas. Outra maneira equivalente de definir ergodicidade é estabelecer que em um sistema a média de uma grandeza sobre uma única partícula é igual à média do ensemble. Uma observação experimental de um sistema ergódico foi realizada por Michaelis e colaboradores está descrita na referência [16].

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

Deste modo, a teoria ergódica explica a substituição das médias temporais pelas médias do espaço de fase coerente com as propriedades geométricas do espaço de fase (de invariância), nas propriedades de transformações que nele são definidos (transformação de medidas de preservação). Assim, este procedimento não resolve o problema ergódico, mas estabelece correspondência entre valores particulares de funções de fase e das medidas experimentais de quantidades físicas. É importante salientar algumas considerações sobre o significado geral do problema ergódico. Como vimos, a característica de ergodicidade pressupõe que o resultados das medições podem ser comparados com as médias de tempo infinito.

Um primeiro aspecto a ser considerado ao se falar no problema ergódico está no fato de que o próprio ato de medição requer um determinado tempo, o qual pode ser muito longo em relação à escala temporal de eventos microscópicos. Portanto, assumimos o resultado de medidas de determinadas quantidades representam o valor

da quantidade em questão ao longo de tempo tão longo que pode ser considerado infinito. Embora esses aspectos considerados sejam plausíveis, em algumas observações, eles não são corroborados. Há casos em que as escalas de tempo microscópica e macroscópica não são muito diferentes, por exemplo, quando avaliamos o efeito da interação entre moléculas de gás e as paredes do recipiente. Para resultados que sejam médias para um tempo infinito, poderemos, então, obter resultados referentes apenas a quantidades para sistemas em equilíbrio. O que conduz ao fato de que não podemos medir desta forma quantidades cujos valores transitem do não-equilíbrio para o equilíbrio. Sendo as condições da teoria ergódica aceitas, medidas de desvio se tornam impossíveis.

Além da ergodicidade existe outra questão a ser discutida, o *phase mixing*, que, basicamente falando, trata-se do quanto o espaço de fase se "misturou", "mesclou" ao longo da evolução temporal. O *phase mixing* implica certas consequências no movimento e comportamento dos elementos envolvidos. Existem várias possibilidades de distorção do elemento de fase com relação à sua forma inicial. A trajetória de cada ponto evolui de maneira divergente com relação a pontos inicialmente próximos, divergindo exponencialmente ao longo do tempo. [42].

Uma das explicações dadas de porque as teorias sobre relaxação violenta falham é que o estado quasi-estacionário é alcançado antes de uma mistura de fase completa, correspondendo ao que se denomina mistura incompleta ("phase mixing").

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

Uma analogia pode ser feita tomando um copo com 30% de tequila e 70% de suco de tangerina, é de se esperar que todo elemento de volume finito no copo conterà essas mesmas proporções (30% e 70% de tequila e suco de tangerina, respectiva-

mente), enquanto que se tomarmos elementos de volume infinitesimais poderemos encontrá-los com 100% de tequila ou 100% de suco de tangerina (e.g. Arnold e Avez [43]).

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

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

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\mu_0(A_t \cap B)}{\mu_0(B)} = \mu_0(A). \quad (3.38)$$

Dessa forma a propriedade do *mixing* implica em ergodicidade. Sendo  $A_t$  um

subconjunto invariante do espaço de fase,  $A_t = A$  e  $A_t \cap A = A \cap A = A$ , temos então:

$$\mu_0(A_t \cap A) = \mu_0(A). \quad (3.39)$$

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

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mu_0(A_t \cap A) = [\mu_0(A)]^2. \quad (3.40)$$

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

No presente trabalho abordamos o problema ergódico de três maneiras. A primeira é feita analisando o desvio padrão das médias temporais das velocidades de cada partícula, a segunda analisando os tempos de visitaçao das partículas em células no espaço dos momentos e a terceira, usando o método do funcional dinâmico. Os métodos mencionados serão descritos mais adiante.

### 3.6.1 Método direto: Dispersão nas médias temporais das velocidades e posições de cada partícula

Consideramos a evolução temporal de uma partícula para computar sua média temporal, enquanto a média do ensemble é obtida tomando a média sobre as  $N$  do sistema em questão. Em um sistema ergódico as médias temporal e do ensemble de partículas coincidem. Tomamos, então, o momento  $p_k(t)$  da partícula  $k$  e sua posição  $x_k(t)$  no tempo  $t$ , suas médias podem ser escritas, respectivamente, como:

$$\bar{p}_k(t) = \frac{1}{n} \sum_{j=0}^n p_k(j\Delta t), \quad (3.41)$$

e

$$\bar{x}_k(t) = \frac{1}{n} \sum_{j=0}^n x_k(j\Delta t), \quad (3.42)$$

em que  $\Delta t$  é o intervalo de tempo constante que usamos como o passo de integração e  $j$  é o número total destes intervalos e  $n$  é um número inteiro. As médias temporais são computadas pra um dado tempo  $t$  descrito pelo argumento de tempo de  $\bar{p}_k(t)$  e  $\bar{x}_k(t)$  no lado esquerdo das Eqs. (3.41) e (3.42). As médias do ensemble para o tempo  $t$ , por sua vez, podem ser escritas como:

$$\langle p(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N p_i(t), \quad (3.43)$$

e

$$\langle x(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N x_i(t). \quad (3.44)$$

Para um sistema ergódico  $\bar{p}_k$  e  $\bar{x}_k$  são os mesmos para todas partículas, e, portanto, seus desvios padrão:

$$\sigma_{\bar{p}}(t) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \bar{p}_k(t)^2 - \langle \bar{p}(t) \rangle^2}, \quad (3.45)$$

e

$$\sigma_{\bar{x}}(t) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \bar{x}_k(t)^2 - \langle \bar{x}(t) \rangle^2}, \quad (3.46)$$

devem tender a zero ao longo do tempo. Nas Eqs. (3.45) e (3.46) usamos  $\langle \bar{p}(t) \rangle \equiv (1/N) \sum_k \bar{p}_k(t)$  e  $\langle \bar{x}(t) \rangle \equiv (1/N) \sum_k \bar{x}_k(t)$ .

Assim, o método direto consiste em verificar numericamente que  $\sigma_{\bar{p}}$  e  $\sigma_{\bar{x}}(t)$  tendem a zero e o atingem para um dado tempo suficientemente longo  $t$  [44]. A análise para mais de uma dimensão espacial deve ser a mesma para cada componente da posição e do momento.

Torna-se interessante também notar a relação entre ergodicidade e difusão anômala em sistemas com interação de longo alcance. Para isso, levantamos alguns

aspectos. No limite  $\Delta t \rightarrow 0$ , a Eq. (3.41) é reescrita como:

$$\bar{p}_k = \frac{1}{t} \int_0^t dt p_k(t) = \frac{m}{t} \int_{x_k(0)}^{x_k(t)} dx_k = \frac{m}{t} [x_k(t) - x_k(0)], \quad (3.47)$$

em que  $m$  é a massa e  $t$  o tempo.

Substituindo a Eq. (3.47) na Eq. (3.45) e assumindo  $\langle p(t) \rangle = 0$  obtemos:

$$\sigma_{\bar{p}}(t) = \frac{m}{t} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N [x_k(t) - x_k(0)]^2}. \quad (3.48)$$

A difusão anômala está presente nos sistemas com interação de longo alcance em que o desvio padrão da distância percorrida pela partícula satisfaz a equação seguinte:

$$\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N [x_k(t) - x_k(0)]^2 = Ct^\mu, \quad (3.49)$$

com  $C$  e  $\mu$  constantes. O caso em que  $\mu \neq 1$  corresponde à difusão anômala à qual nos referimos. Das Eqs. (3.45), (3.47) e (3.48) temos

$$\sigma_{\bar{p}}(t) = mCt^{\mu/2-1}. \quad (3.50)$$

Como uma consequência da descrição em questão, o sistema é sempre ergódico na variável momento para  $\mu < 2$ , mas o tempo de observação necessário para a ergodicidade pode ser muito longo para  $\nu$  menor mas próximo de 2. Por outro lado, a mesma análise não pode ser feita para a variável posição, uma vez que não há relação análoga à estabelecida na Eq. (3.47).

### 3.6.2 Método *sojourn time*: Tempos de visitação em células no espaço dos momentos

Vamos agora apresentar sucintamente a abordagem de Rebenshok e Barkai [45] feita no contexto do tempo contínuo de movimento aleatório (da sigla em inglês CTRW - Continuous Time Random Walk). O tempo de visitação  $t_{k,j}^{(s)}$  é o tempo gasto

no estado  $k$  durante a  $j$  – ésima visita. A soma dos tempos de visitação define o tempo de permanência na célula  $k$ :

$$t_k = \sum_j t_{k,j}^s. \quad (3.51)$$

A função densidade de probabilidade para a média temporal de uma observável  $\bar{O}$  é dada por[45]:

$$f^{(\alpha)}(\bar{O}) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \text{Im} \frac{\sum_{k=1}^L p_k^{eq} (\bar{O} - \bar{O}_k + i\epsilon)^{\alpha/2-1}}{\sum_{k=1}^L p_k^{eq} (\bar{O} - \bar{O}_k + i\epsilon)^{\alpha/2}}, \quad (3.52)$$

em que  $O_k$  é o valor da observável quando o sistema está no estado discreto  $k$  e  $L$  é o número de estados possíveis e  $p_k^{eq}$  é a probabilidade que um elemento do ensemble do sistema ocupe o estado  $k$  no equilíbrio. A média temporal da observável  $O_k$  é:

$$\bar{O} = \frac{1}{t_{tot}} \sum_{k=1}^L t_k O_k, \quad (3.53)$$

com  $t_{tot} = \sum_{i=1}^L t_i$  e  $p_k^{eq}$  é a probabilidade que um elemento do ensemble do sistema ocupe o estado  $k$  no equilíbrio.

Os tempos de visitação  $t_{k,j}^{(s)}$  podem ser descritos por uma distribuição com cauda em lei de potência [19], essa característica é comum em distribuições de intervalos de tempo na descrição do comportamento de sistemas físicos [46].

Então, para o caso de uma distribuição Gaussiana com  $\alpha = 2$ , a equação (3.52) assume a forma:

$$f^{(2)}(\bar{O}) = \delta(\bar{O} - \langle \bar{O} \rangle). \quad (3.54)$$

Assim, a média de ensemble e a média temporal da observável  $O_k$  são iguais, o que torna evidente o caráter ergódico do sistema [19]. Os casos não-ergódicos são

classificados como fortemente não-ergódico quando uma região do espaço de fase em questão é inacessível, e fracamente não-ergódico quando ele é todo acessível, mas com probabilidades diferentes de medida em cada região.

### 3.6.3 Método do Funcional Dinâmico

Para processos estacionários infinitamente divisíveis  $Y(n)$ , com  $n$  inteiro, o funcional dinâmico é dado pela transformada de Fourier com o número de onda do processo  $Y(n) - Y(0)$  [47, 48, 49]:

$$D(n) = \langle e^{i[Y(n)-Y(0)]} \rangle, \quad (3.55)$$

em que  $\langle \dots \rangle$  expressa a média do ensemble, ou seja, uma média sobre várias realizações do processo estocástico  $Y(n)$ . De uma forma mais geral, o funcional dinâmico pode ser escrito conforme introduzido por Podgórski e Weron [47]:

$$D(Y, t) = \langle e^{i[T_t Y - Y]} \rangle, \quad (3.56)$$

em que,  $T_t$  é um operador que preserva medida no espaço de probabilidade considerado. Sabendo que para um sistema ergódico, tem-se a seguinte condição [47], a qual provém da ideia de média temporal igual à média do ensemble:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t T_t Y dt = \langle Y \rangle, \quad (3.57)$$

a qual nos conduz à relação:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \langle (T_t Y) Y \rangle dt = \langle Y \rangle^2, \quad (3.58)$$

que pode ser reescrita para  $D(Y, t)$  como:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \int_0^n D(Y, t) dt = |\langle e^{iY} \rangle|^2, \quad (3.59)$$

uma vez que, em um sistema ergódico, para um número complexo  $Z = X + iY$  e seu complexo conjugado  $\bar{Z} = X - iY$ :

$$\begin{aligned} & \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \langle (T_t Z) \bar{Z} \rangle dt = \\ & \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \langle (T_t X + iT_t Y)(X - iY) \rangle dt = \\ & \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \langle (T_t X) X \rangle dt - i^2 \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \langle (T_t Y) Y \rangle dt \\ & -i \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \langle (T_t X) Y \rangle dt + i \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \langle (T_t Y) X \rangle dt = \\ & \langle X \rangle^2 + \langle Y \rangle^2 = |\langle Z \rangle|^2. \end{aligned}$$

Com  $D(Y, t) = \langle (T_t e^{iY}) e^{-iY} \rangle$ , é possível escrever que a condição de ergodicidade é obedecida se e somente se [49]:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n-1} D(k) = |\langle e^{iY(0)} \rangle|^2. \quad (3.60)$$

Sendo a condição geral de mixing [47]:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle (T_t Y) Y \rangle = \langle Y \rangle^2, \quad (3.61)$$

a condição de mixing é satisfeita para o sistema em questão se e somente se:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} D(n) = |\langle e^{iY(0)} \rangle|^2. \quad (3.62)$$

Identificamos  $Y(n)$  para as variáveis posição ou momento, para qualquer de suas componentes, no tempo  $n\Delta t$  para um intervalo de tempo fixo  $\Delta t$ , tal que

$$\langle e^{i[Y(n) - Y(0)]} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N e^{i[p_k(n\Delta t) - p_k(0)]}, \quad (3.63)$$

e analogamente para a posição.

Torna-se útil definir assim as funções para ergodicidade e mixing, respectivamente, como:

$$Q(n) \equiv \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n-1} E(k)$$

e

$$E(n) \equiv D(n) - |\langle e^{iY(0)} \rangle|^2. \quad (3.64)$$

Deste modo, as Eqs. (3.60) e (3.62) podem ser reescritas, respectivamente, como:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} Q(n) = 0, \quad (3.65)$$

e

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E(n) = 0. \quad (3.66)$$

Para muitas teorias de relaxação violenta o teste de mixing é importante, uma vez que pressupõem o mixing na evolução inicial, como, por exemplo, no trabalho de Lynden Bell [7].

Assim, definimos o tempo para a ergodicidade como o intervalo de tempo necessário para que a diferença entre as médias temporal e do ensemble sejam irrisórias, o qual pode ser estimado usando o método direto, que nada mais é que a implementação da própria definição de ergodicidade. A truncatura nos tempos de visitaçã e o valor de  $n$  em Eqs. (3.59) e (3.66) em que  $E(n)$  e  $Q(n)$  estão próximos de zero, embora estejam relacionados ao tempo de ergodicidade, não são, a priori, os mesmos.

## 4 Modelos de Sistemas e Métodos Computacionais

Foram desenvolvidas simulações computacionais a fim de analisar as propriedades de sistemas autogravitantes, utilizando o Método Monte Carlo e Dinâmica Molecular. Para tanto utilizamos alguns modelos distintos de sistemas em uma e duas dimensões, os quais abordamos a seguir.

### 4.1 Modelos de Sistemas

Para as simulações de sistemas autogravitantes em uma e duas dimensões implementamos os já conhecidos potenciais que satisfazem a equação de Poisson (2.4), além de usar também o modelo de soma de Ewald para uma dimensão [50], o qual possui potencial e campo bem definidos, o modelo do anel (Ring Model)[51, 52] e o HMF [18] já introduzido neste trabalho.

#### 4.1.1 Método de soma de Ewald em uma dimensão

Tal modelo trata-se de um arranjo linear de folhas de massas iguais ou densidade de carga de modo tal que a força numa determinada folha é proporcional à diferença entre o número de folhas à sua esquerda e à sua direita [50]. Dadas as condições do sistema é necessário estabelecer condições de contorno periódicas, com as quais o movimento se dá em um toro. Assim, a expressão geral para o potencial periódico

$V(x)$  é dada por:

$$V_1(x) = 2\pi mG \left[ |x - x_1| - \frac{1}{2L}(x - x_1)^2 \right], \quad (4.1)$$

em que  $x$  é a posição de uma das folhas de massa e  $x_1$ , a posição da folha de massa em questão, sendo  $2L$  o período em que é distribuída a densidade de massa, de modo tal que  $-L < x < L$ . O termo periódico é obtido através da soma sobre as posições relativas das réplicas da partícula de massa  $m$  na posição  $x_1$  ao longo do toro [50]. Algumas observações devem ser feitas acerca deste potencial: além da conhecida contribuição (em uma dimensão) da massa localizada em  $x_1$ , há também um termo quadrático adicional; no limite  $L \rightarrow \infty$  o termo quadrático vai a zero e o potencial passa a ser o tradicional para massas em uma dimensão, não-periódico, os termos do potencial são funções da distância  $x - x_1$ , assim, não há posições especiais ou intervalos, todas as posições ao longo do toro são equivalentes; não há necessidade de distinção da direção em que deve ser computado o potencial, em qualquer direção o valor do potencial  $V_1$  será o mesmo.

### 4.1.2 Modelo do Anel (*Ring Model*)

Trata-se de um modelo segundo o qual massas iguais estão contidas em um anel e sujeitas a atração gravitacional tridimensional. Pode ser representado pela Figura 2.

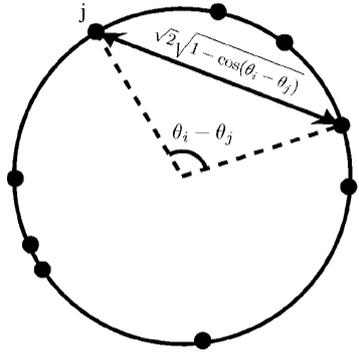


Figura 2: Modelo do anel autogravitante com raio unitário.

Para pequenas distâncias, o potencial é regularizado, de modo tal que as partículas não interagem. O potencial do modelo em questão [52] é designado pela seguinte equação:

$$V_\epsilon(\theta_i - \theta_j) = \frac{-1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{1 - \cos(\theta_i - \theta_j) + \epsilon}}, \quad (4.2)$$

em que  $\epsilon$  é o parâmetro de amortecimento, um parâmetro computacional usado com a finalidade de evitar a divergência no cálculo do potencial,  $\theta_i$  e  $\theta_j$  são as posições angulares das partículas  $i$  e  $j$  no anel.

O modelo em questão tem sido explorado e simulado numericamente, evidenciando características como calor específico negativo em determinada fase, transição de fase quando utilizado um parâmetro de amortecimento suficientemente pequeno, enquanto que para um parâmetro de amortecimento grande, esse sistema se reduz ao conhecido modelo de Hamiltoniana de Campo Médio (HMF) [18].

## 4.2 Método Monte Carlo

Para estabelecer a Construção de Maxwell para sistema no modelo do anel e comparação entre os ensembles canônico e microcanônico, utilizamos a simulação em Monte Carlo.

O método Monte Carlo é um método computacional que se baseia em simulações que geram amostras aleatórias a fim de obter resultados numéricos.

A denominação do método em questão deve-se ao Grand Casino no principado de Mônaco, em Monte Carlo, que é um ícone de jogos de azar, em referência ao caráter randômico do método.

A simulação Monte Carlo descreve modelos cuja evolução não se dá de maneira rigorosamente predefinida, mas que evolue de maneira randômica ou estocástica, evolução ao longo da qual sejam gerados, portanto, números randomicamente [53].

O referido método tem ampla aplicação no que diz respeito a problemas de Mecânica Estatística [54]. Acerca destes problemas é possível descrevê-los e resolvê-los tomando uma amostra do espaço de fase a fim de estimar determinadas propriedades do modelo em questão. Deste modo, simulações Monte Carlo são capazes de calcular medidas de sistemas de muitas partículas para Mecânica Estatística de Equilíbrio.

O método de simulações Monte Carlo depende diretamente da geração eficiente de números aleatórios, assim, surgiram diferentes geradores de números randômicos a serem utilizados nas simulações [53]. No apêndice deste trabalho são mostrados os algoritmos utilizados para aplicação do método Monte Carlo para o modelo do anel.

## 4.3 Dinâmica Molecular

Para as simulações de sistemas autogravitantes utilizamos um integrador simplético de quarta ordem desenvolvido por Yoshida [17]. O qual é descrito a seguir:

### 4.3.1 Integrador Simplético

Várias propostas de integradores simpléticos existem na literatura [17]. Algoritmo de integração simplética de ordens 6 e 8 são aplicadas para integração de trajetórias clássicas. Considerando o comportamento estocástico dessas trajetórias os integradores de ordem 8 são bastante eficazes. Os operadores simpléticos para sexta e oitava ordens são obtidos com alguns passos relativamente simples, com certos coeficientes obtidos da solução numérica de equações algébricas. No presente contexto utilizamos um integrador de quarta ordem que é utilizado em vários trabalhos [55].

Para sistemas Hamiltonianos, a ideia é construir integradores simpléticos de alta ordem explícitos e reversíveis temporalmente. Existe, ao menos, um integrador simplético com coeficientes exatos para qualquer ordem. O integrador mais simples, desenvolvido por Forest [56] e Neri [57] é o de quarta ordem.

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

Neri [57] desenvolveu uma maneira geral de construir o integrador simplético explícito para uma Hamiltoniana  $H = T(p) + V(q)$ . Apesar de ser muito complicado aplicar a construção de Neri para integradores de sexta e oitava ordem, ele se aplica

facilmente a integradores de quarta ordem.

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

$$e^{\tau(A+B)} = \prod_{i=1}^k e^{(c_i\tau A)}e^{(d_i\tau B)} + o(\tau^{n+1}). \quad (4.3)$$

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

$$e^{\tau(A+B)} = e^{(c_1\tau A)}e^{(d_1\tau B)} + o(\tau^2). \quad (4.4)$$

Embora este seja um problema um tanto quanto geral ele tem ampla aplicação, é diretamente relacionado ao integrador simplético de sistemas Hamiltonianos [57].

Aplicando a equação (4.3) ao operador de evolução temporal  $e^{\{H,\cdot\}}$  com  $H = T + V$ , podemos obter o integrador simplético da ordem desejada.

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

$$\dot{z} = \{z, H(z)\}, \quad (4.5)$$

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

$$z(t) = e^{\tau D_H} z(0), \quad (4.6)$$

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

$$z(t) = e^{\tau(A+B)}z(0). \quad (4.7)$$

Supomos o conjunto de números reais  $(c_i, d_i)$ ,  $i = (1, 2, \dots, k)$  que satisfazem a equação (4.3) para um dado  $n$  inteiro. Consideramos a evolução de  $z = z(0)$  a  $z' = z(\tau)$ , que e dado por:

$$z' = \left( \prod_{i=1}^k e^{(c_i\tau A)} e^{(d_i\tau B)} \right) z. \quad (4.8)$$

Essa descrição é dita simplética porque é simplesmente o produto de descrições simpléticas elementares e se aproxima da solução exata (4.7) para ordens acima de  $o(\tau^n)$ . A equação (??) é explicitamente computável. Ela nos dá a sucessão de descrições:

$$q_i = q_{i-1} + \tau c_i \frac{\partial T}{\partial p}(p_i - 1), \quad (4.9)$$

$$p_i = p_{i-1} + \tau d_i \frac{\partial T}{\partial q}(q_i - 1), \quad (4.10)$$

para  $i = l$  até  $i = k$ , temos  $(q_0, p_0) = z$  e  $(q_k, p_k) = z'$ , um integrador simplético da *enésima* ordem é deste modo obtido. Para uma abordagem direta do problema, devemos expandir o lado esquerdo da equação (4.8) em potências de  $\tau$  e igualar com os coeficientes de iguais potências de  $\tau$  para ordens superiores a  $\tau^n$ . Obtemos um conjunto de equações algébricas não-lineares para  $c_i$  e  $d_i$  desconhecidos. Por exemplo, para  $n=1$  (integrador de primeira ordem) temos as seguintes relações para os coeficientes de  $A$  e  $B$ , portanto:

$$c_1 + c_2 + \dots c_k = 1, \quad (4.11)$$

e

$$d_1 + d_2 + \dots d_k = 1. \quad (4.12)$$

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

$$S(\tau) = \prod_i = e^{(c_i \tau A)} e^{(d_i \tau B)} = e^{([\tau(A+B) + o(\tau^{n+1})])}. \quad (4.13)$$

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

$$S_4(\tau) = S_2(x_1 \tau) S_2(x_0 \tau) S_2(x_1 \tau), \quad (4.14)$$

onde  $x_0$  e  $x_1$  são valores reais a serem determinados. Utilizando (4.13) e após alguns cálculos, chegamos a:

$$x_0 = \frac{-2^{1/3}}{2 - 2^{1/3}} \quad (4.15)$$

e

$$x_1 = \frac{1}{2 - 2^{1/3}} \quad (4.16)$$

Ao comparar (4.14) com (4.13) obtemos as seguintes relações para os coeficientes:

$$d_1 = d_3 = x_1, \quad (4.17)$$

$$d_2 = x_0, \quad (4.18)$$

$$c_1 = c_4 = \frac{x_1}{2} \quad (4.19)$$

e

$$c_2 = c_3 = \frac{(x_0 + x_1)}{2} \quad (4.20)$$

Com os valores de (4.15) e (4.16) é possível determinar (4.14) exatamente como o integrador simplético de quarta ordem.

O programa do integrador simplético foi implementado em nosso trabalho e utilizado na forma obtida por Yoshida [17].

## 5 Resultados obtidos

Nossos resultados foram obtidos para sistemas autogravitantes em uma e duas dimensões, utilizando simulações computacionais em fortran para o Método Monte Carlo, e CUDA para os demais. A programação em paralelo em CUDA possibilitou a obtenção de resultados de forma eficiente e, portanto, a exploração para diversas condições iniciais.

### 5.1 Construção de Maxwell em sistemas de interação de longo alcance - O caso do modelo do anel.

Nesta seção analisamos as propriedades temperatura e entropia dos ensembles canônico e microcanônico e fazemos a construção de Maxwell para sistemas de interação de longo alcance, considerando o modelo do anel (ring-model) [52] constituído por  $N = 5000$  partículas. Os resultados a serem mostrados a seguir foram obtidos utilizando simulação Monte Carlo para calcular as propriedades termodinâmicas do sistema em questão, com isso foi possível obter os gráficos de entropia e temperatura para os respectivos ensembles.

A fim de explicar mais detalhadamente os aspectos referentes à construção de Maxwell para o modelo do Anel é útil descrever como ela é feita para sistemas com interações de curto alcance.

- **Construção de Maxwell em sistemas de interações de curto alcance**

É importante que consideremos a equivalência de ensembles na existência de transições de fase. As transições de fase estão associadas a singularidades nas funções termodinâmicas. Nos ensembles canônico e microcanônico são sinalizadas por descontinuidades nas derivadas da entropia  $s$  ou da energia livre  $\varphi$ . Consideramos  $s$  e  $\varphi$  funções da energia  $E$  e do inverso da temperatura  $\beta$ , tomamos um modelo em que a entropia  $s(E)$  tem curvatura zero ao longo do intervalo  $[E_1, E_2]$ , nos extremos do intervalo  $s(E)$  apresenta descontinuidade, no intervalo em questão a função é não estritamente côncava [1]. Para o intervalo o sistema se divide em duas fases de diferentes energias  $e_1$  e  $e_2$ . A energia é dada por uma relação que é consequência direta da propriedade de aditividade:

$$E = cE_1 + (1 - c)E_2, \quad (5.1)$$

sendo  $c$  é a fração da fase 1 e  $(1 - c)$  a fração correspondente à fase 2.

Neste caso, não há correspondência de um para um entre  $E$  e  $\beta$ , uma vez que vários estados microcanônicos macroscópicos são representados por um único estado canônico, deste modo, na presença de transições de fase de primeira ordem a relação entre os ensembles deve ser feita com cautela. Para transição de fase de segunda ordem, se recupera a entropia estritamente convexa e há a correspondência direta entre  $E$  e  $\beta$ .

A entropia pode apresentar uma região convexa, para sistemas de curto alcance isso é observado próximo de uma transição de fase. Aumentando-se o sistema, para modelos simples, a entropia se aproxima do "envelope côncavo" com a linha tracejada, o qual é construído substituindo a linha contínua conforme mostra a Fig.(3). Tal processo é conhecido como a construção de Maxwell, a

qual pode ser compreendida pela relação:

$$s(E_2) = s(E_1) + \int_{E_1}^{E_2} \beta(E) dE, \quad (5.2)$$

que nos conduz a:

$$s(E_2) = s(E_1) + (E_2 - E_1)\beta_t, \quad (5.3)$$

em que  $\beta_t = \beta(E_1) = \beta(E_2)$ . Separando em dois intervalos  $[E_1, E_3]$  e  $[E_3, E_2]$  e usando  $\int_{E_1}^{E_2} \beta(E) dE = (E_2 - E_1)\beta_t$ , temos:

$$(E_1 - E_3)\beta_t + \int_{E_1}^{E_3} \beta(E) dE = (E_2 - E_3)\beta_t + \int_{E_2}^{E_3} \beta(E) dE. \quad (5.4)$$

O valor de  $E_3$  é obtido do ponto de maior declive da convexidade de  $s(E)$ . A condição estabelecida em (5.4) nos diz que as áreas  $A_1$  e  $A_2$  na Fig.(3) são iguais. Usando a eq.(2.14) para energia livre, obtemos:

$$\varphi(\beta_t, E_1) = \varphi(\beta_t, E_2). \quad (5.5)$$

Tudo isso nos mostra que a construção de Maxwell com áreas iguais é equivalente à entropia côncava e conduz à igualdade entre as funções de energia livre para  $E_1$  e  $E_2$ .

Observando a Fig.(3) é fácil notar que a construção de Maxwell é uma aplicação do princípio de máxima entropia para sistemas aditivos, uma vez que a entropia da linha tracejada é maior que na linha contínua.

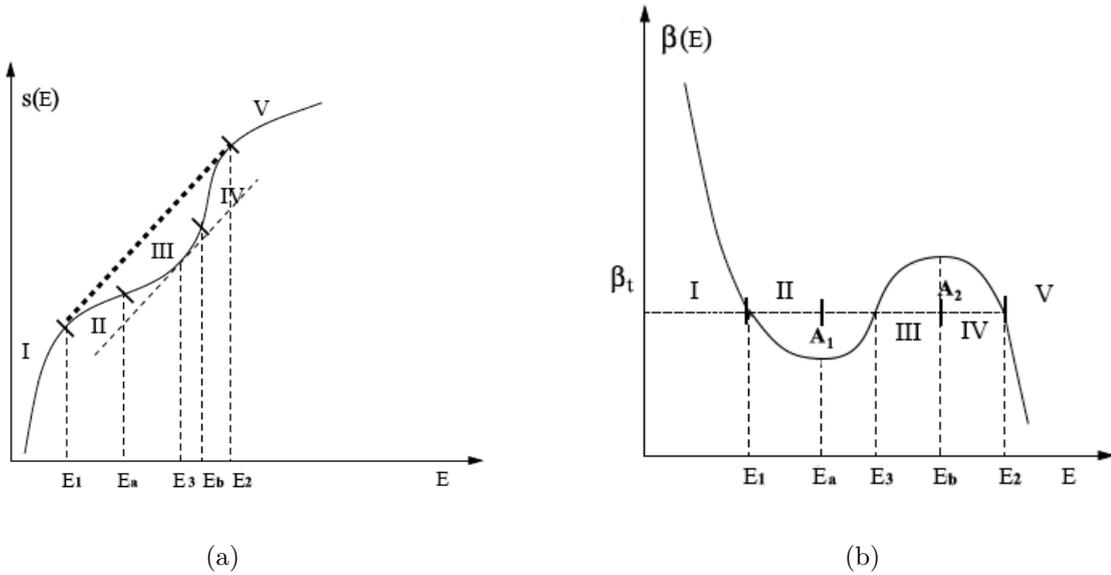


Figura 3: a) Gráfico da entropia em função da energia. b) Inverso da temperatura  $\beta$  em função da energia. A linha tracejada é a construção de Maxwell.

Analisando o gráfico da Fig. (3) fazemos, ainda, as seguintes observações para curto alcance: as regiões *I* e *V* são pertinentes a estados estáveis. A região *III* é de estados instáveis por ser uma convexidade local, as regiões *II* e *IV* são metaestáveis.

- **Construção de Maxwell para sistemas com interações de longo alcance**

Como vimos, para um sistema de interações de curto alcance em que o gráfico da entropia em função da energia apresenta uma região convexa, é possível substituir a referida região por um "envelope côncavo" com a linha tracejada, que corresponde a uma separação de fases 1 e 2, conforme ilustra a Fig (3) [58], [2], e se recuperar a equivalência de ensembles. Tal procedimento é a construção de Maxwell. No entanto, sistemas com interações de longo alcance são não-aditivos, o que impossibilita a separação em fases, e impede, portanto, a recuperação da equivalência de ensembles.

Observamos primeiramente as propriedades de temperatura e de entropia para o ensemble microcanônico para o intervalo de energia  $[-0.99, 0.2]$ .

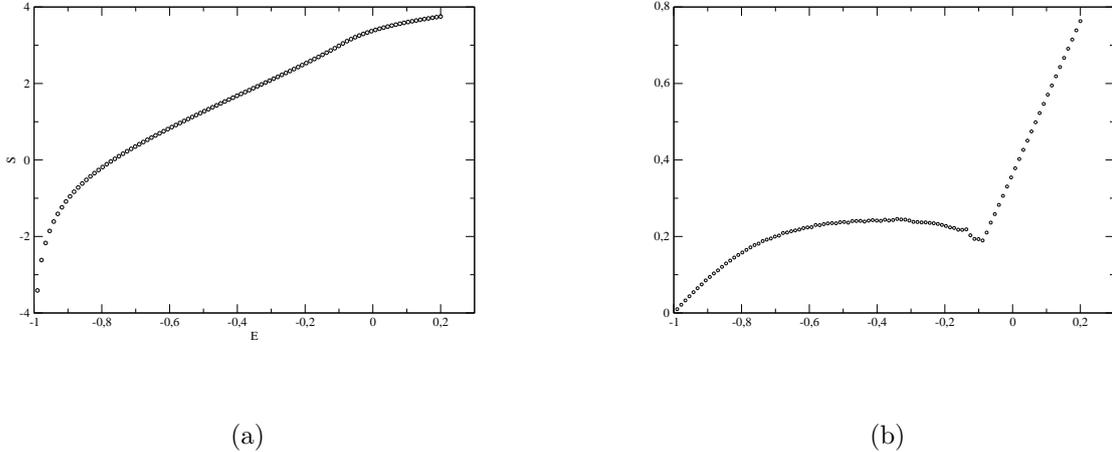


Figura 4: a) Entropia em função da energia no ensemble microcanônico para um sistema no modelo do Anel para o intervalo de energia  $[-0.99, 0.2]$ . b) Temperatura em função da energia no ensemble microcanônico para um sistema no modelo do Anel para o intervalo de energia  $[-0.99, 0.2]$ .

No ensemble microcanônico a convexidade na curva de temperatura em função da energia corresponde à região de calor específico negativo [58] dado que:

$$\frac{d^2 S}{dE^2} = \frac{-1}{C_v T^2}, \quad (5.6)$$

com a convexidade  $\frac{d^2 S}{dE^2} \geq 0$ , logo  $C_v \leq 0$ . Por outro lado, para o ensemble canônico o calor específico é sempre positivo, como demonstrado anteriormente.

Assim, enquanto no ensemble microcanônico não há singularidade na entropia, no ensemble canônico há uma descontinuidade correspondente a um salto da energia associado ao calor latente de transição de fase. No intervalo  $[E_1, E_2]$  estados macroscópicos de equilíbrio não existem, uma vez que, diferentemente

do caso de curto alcance, com a não-aditividade não é possível a existência da mistura de estados como na equação (5.3). A temperatura da transição de fase, no caso canônico, é obtida com a construção de Maxwell.

Partimos, agora, para a análise e construção de Maxwell para o modelo do anel.

Para a discussão levamos em conta o critério de máxima entropia para o ensemble canônico, que equivale a minimizar a energia livre de Helmholtz  $F = E - TS$  a partir do ensemble microcanônico, uma vez que com a energia livre levamos em conta o banho térmico, o que conduz à abordagem canônica. Assim sendo, mostramos na figura 5 os gráficos de energia livre de Helmholtz  $F = E - TS$  a fim de aprofundar nossa discussão.

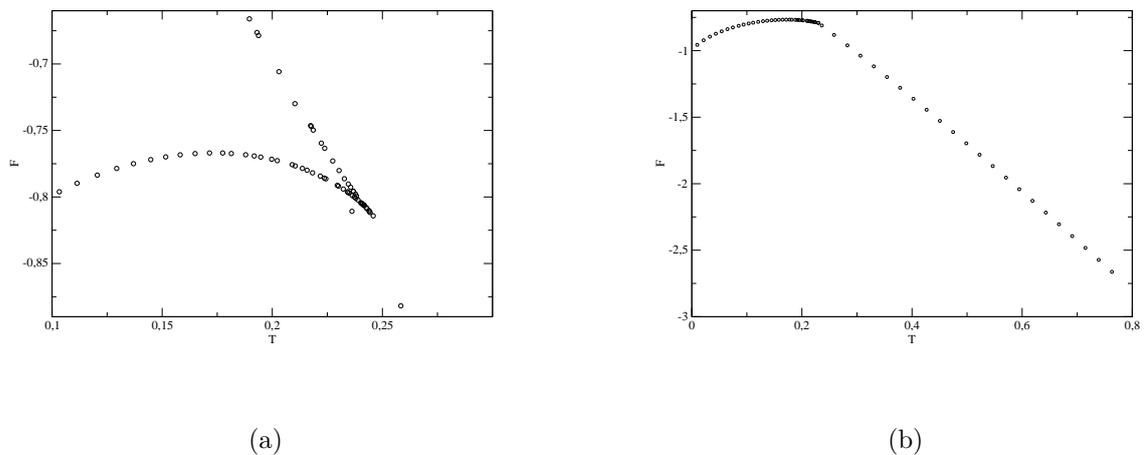


Figura 5: a) Energia livre em função da temperatura no ensemble canônico para um sistema no modelo do anel com  $N = 5000$  b) Energia livre minimizada em função da temperatura.

É possível notar que existe um intervalo de temperatura para o qual há mais de um valor de  $F$  com a mesma temperatura. O sistema deve seguir os valores de temperatura para os quais a energia livre  $F$  é menor, que corresponde ao

estado estável, os outros valores constituem uma curva metaestável, o que exige uma correção e nos leva à construção de Maxwell para o sistema com interações de longo alcance em questão. A Figura (6) mostra a curva calórica com a construção de Maxwell.

Mostramos a seguir o gráfico da entropia e da temperatura para o ensemble canônico para o intervalo de energia  $[-0.99, 0.2]$  com parâmetro de amortecimento  $\epsilon = 10^{-2}$ .

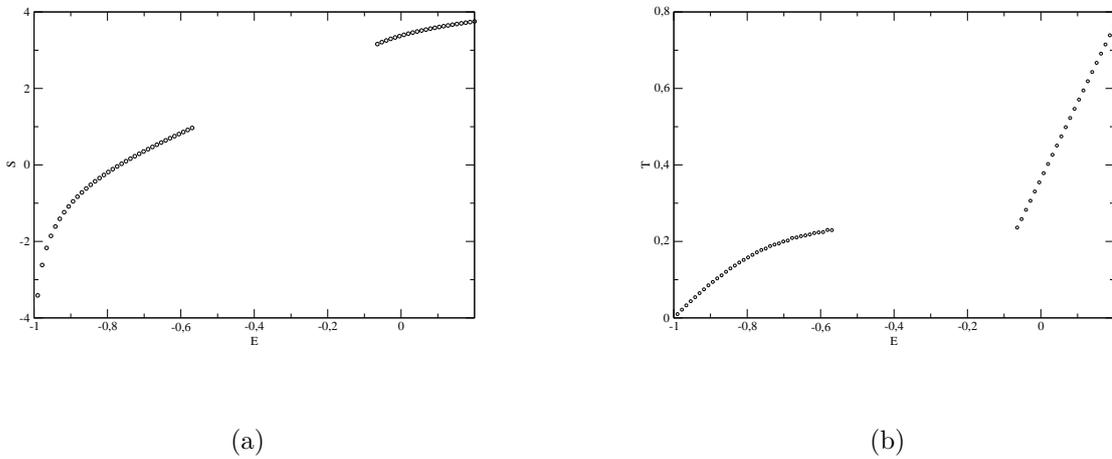


Figura 6: a) Entropia em função da energia no ensemble canônico para um sistema no modelo do anel com  $N = 5000$  partículas para o intervalo de energia  $[-0.99, 0.2]$ . b) Temperatura em função da energia no ensemble canônico o intervalo de energia  $[-0.99, 0.2]$ .

Fazemos a análise pelo princípio de máxima entropia, o que equivale a minimizar a energia livre de Helmholtz  $F = E - TS$ . Analisando por este critério é possível constatar, para o ensemble canônico no longo alcance, que as regiões  $I$  e  $V$  são estáveis. A região  $III$  é instável uma vez que seu calor específico é negativo em virtude da convexidade da entropia. As regiões  $II$  e  $IV$  são metaestáveis, bem como no caso de sistemas com interações de curto alcance.

O que difere, sobretudo, em relação ao curto alcance é que, em virtude da não coexistência de fases, uma consequência da não-aditividade dos sistemas com interações de longo alcance, há um salto na energia de  $E1$  para  $E2$  com uma mesma temperatura, o que é mostrado pela figura (6). Os aspectos abordados corroboram a inequivalência de ensembles para o sistema no modelo do anel.

## 5.2 Propriedades de ergodicidade no modelo de Hamiltoniana de Campo Médio-HMF

A fim de estabelecermos comparações no comportamento de sistemas com interações de longo alcance, investigamos também o modelo de Hamiltoniana de Campo Médio-HMF, descrito na Eq. (2.5), quanto à ergodicidade, utilizando para tanto os três métodos de análise de ergodicidade abordados no presente trabalho. Suas propriedades ergódicas foram estudadas na Ref. [19] usando o método dos tempos de visitaç o somente para o QSS homog neo fora do equil brio. Neste trabalho, discutimos as propriedades erg dicas para os estados homog neos e n o-homog neos no equil brio termodin mico [59]. A Figura 7 mostra o desvio padr o  $\sigma_{\bar{p}}$  na Eq. (3.45) para dois valores distintos de energia por part cula no equil brio termodin mico. Para  $e = 0.4$  o inverso da temperatura    $\beta \approx 3.02$  e o sistema est  em um estado n o-homog neo. Para  $e = 0.8$ , por sua vez, o estado   homog neo com  $\beta \approx 1.67$  e for a de campo m dio n o nula. As velocidades t rmicas m dias s o  $\bar{v} \approx 0.58$  e  $\bar{v} \approx 0.77$ , respectivamente. Inicialmente, observamos que o tempo necess rio para o desvio padr o  $\sigma_{\bar{p}}$  se reduzir em duas ordens de magnitude  , aproximadamente de 6 ordens de magnitude superior ao tempo de travessia  $t_{cr} = 2\pi/\bar{v}$ , i. e. o tempo necess rio para que uma part cula com velocidade t rmica m dia dar uma volta inteira. Figuras 7b e 7d evidenciam que  $\sigma_{\bar{p}}(t)$  escala proporcionalmente ao n mero de part culas  $N$ . Este comportamento  , de certa forma, esperado, uma vez que

para o caso não-homogêneo, como a contribuição colisional para a energia cinética é proporcional a  $1/N$ , no entanto, para o caso homogêneo, o termo colisional é proporcional a  $1/N^2$ . Nesse sentido, a Ref. [60] mostra que o momento estatístico para a função de distribuição de uma partícula, e a própria função de distribuição escalam com o fator  $1/N$  para o caso não-homogêneo e com  $1/N^2$  para o caso homogêneo. No limite de Vlasov, o tempo para atingir o critério de ergodicidade diverge com  $N$ .

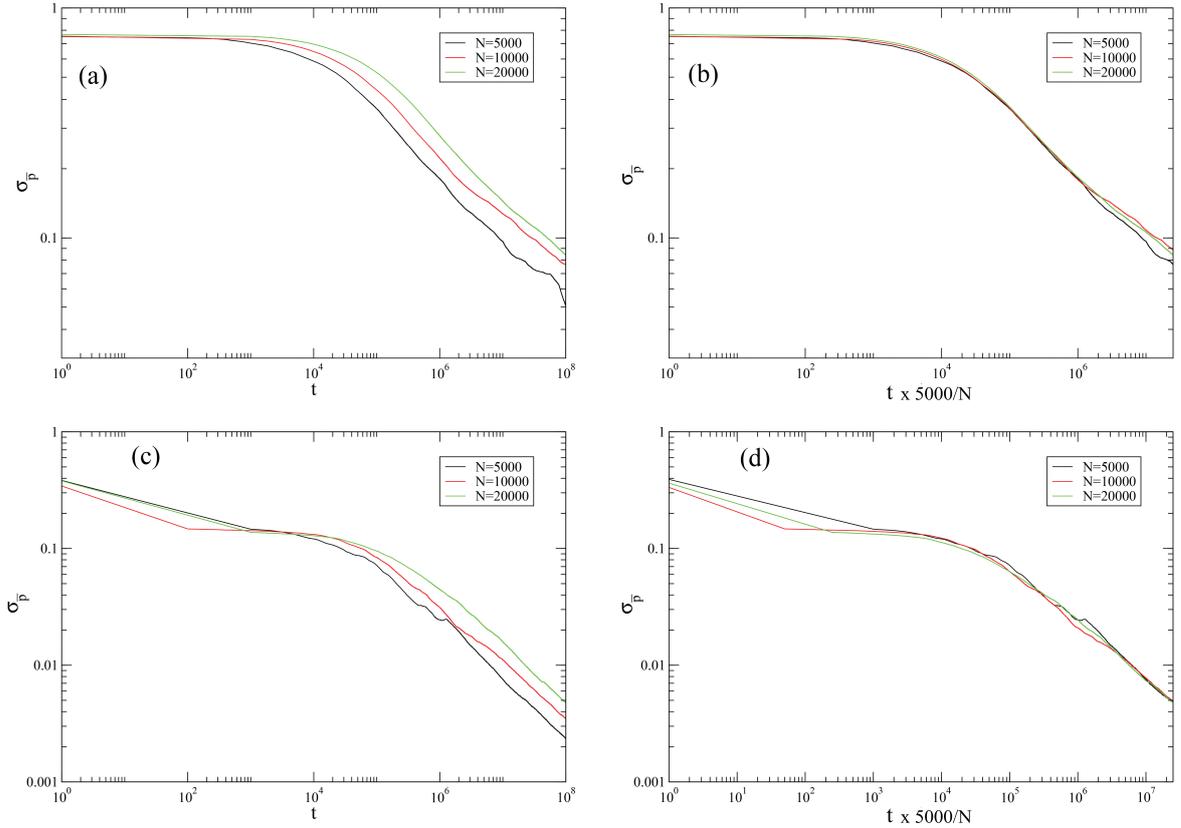


Figura 7: Desvio padrão  $\sigma_{\bar{p}}$  na Eq. (3.45) para a média temporal da velocidade para o modelo HMF para alguns valores de  $N$  no equilíbrio termodinâmico. a) Energia por partícula  $e = 0.4$  (estado não-homogêneo). b) Análogo a (a) mas para o tempo com reescala de  $t \rightarrow t \times 5000/N$ . c) Energia por partícula  $e = 0.8$  (estado homogêneo). d) Análogo a (c) mas para o tempo com reescala de  $t \rightarrow t \times 5000/N$ .

A Figura 8 mostra a distribuição dos tempos de visitação para os mesmos estados iniciais. A cauda apresenta truncatura, corroborando o resultado de Ref. [19].

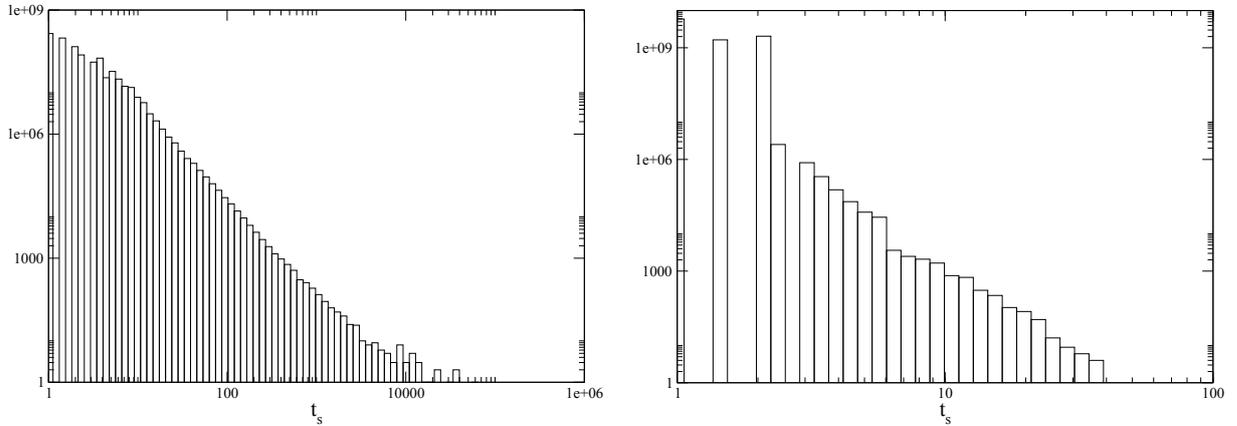


Figura 8: À direita: histograma para o caso não-homogêneo na Fig. 7a, célula de tamanho  $\Delta p = 0.4$  e tempo total de simulação  $t_f = 10^7$ . À esquerda: histograma de frequência dos tempos de visitação no espaço dos momentos para o modelo HMF para o mesmo estado homogêneo da Fig. 7c, com células do espaço dos momentos com comprimento de  $\Delta p = 0.1$ , tempo total de simulação  $et_f = 10^6$ . Ambos os casos apresentam a cauda truncada.

Os resultados para o método do funcional dinâmico, em que  $Q(t)$  representa o critério de ergodicidade e  $E(t)$  o de mixing, conforme mostrado nas equações (??) e (3.66) são representados nas Figs. 10 e 9, podemos concluir, portanto, que o sistema não somente é ergódico, como também obedece ao critério de *mixing* com  $N$  finito.

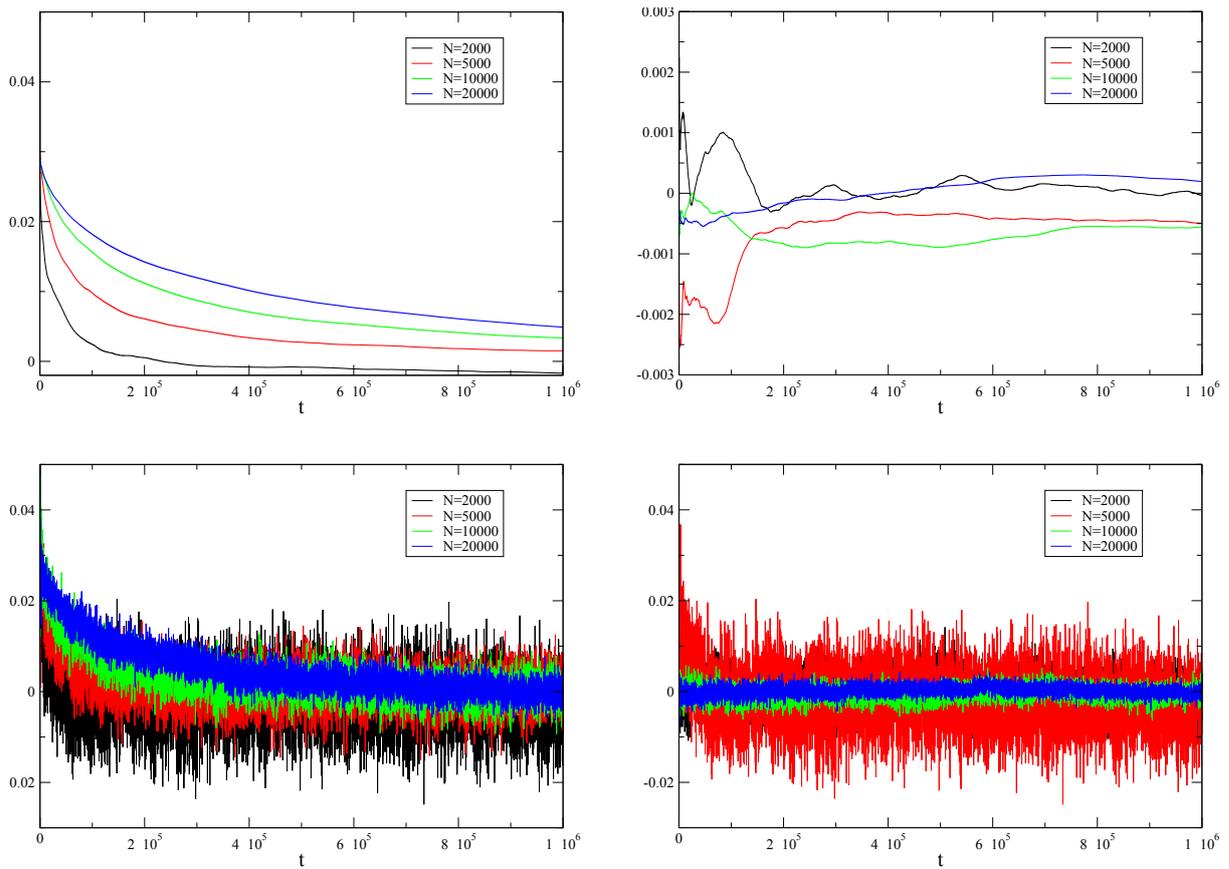


Figura 9: Método do funcional dinâmico para o modelo HMF no estado de equilíbrio não-homogêneo para as mesmas condições da Fig. 7a. a)  $\text{Re}[Q(t)]$ ; b)  $\text{Im}[Q(t)]$ ; c)  $\text{Re}[E(t)]$ ; d)  $\text{Im}[E(t)]$

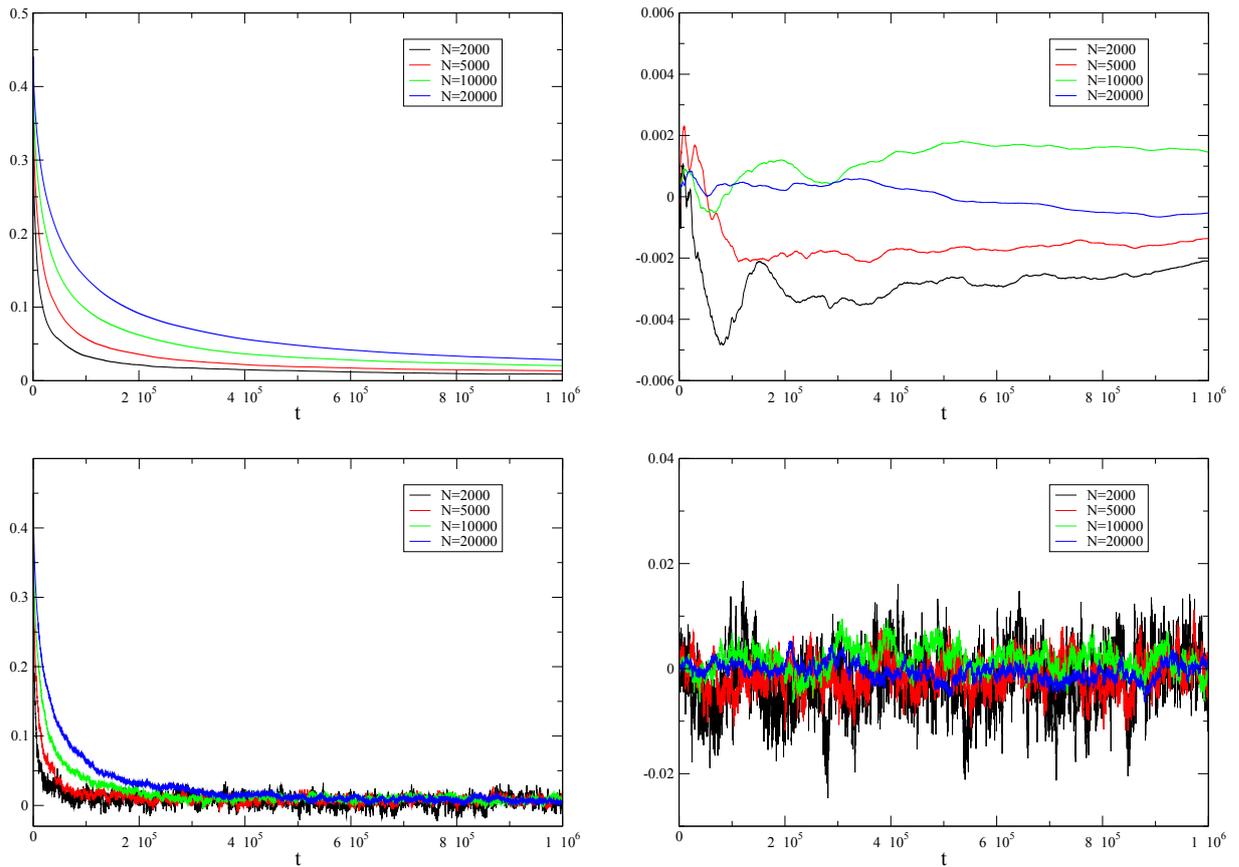


Figura 10: Método do funcional dinâmico para o modelo HMF no estado de equilíbrio homogêneo para as mesmas condições da Fig. 7c. a)  $\text{Re}[Q(t)]$ ; b)  $\text{Im}[Q(t)]$ ; c)  $\text{Re}[E(t)]$ ; d)  $\text{Im}[E(t)]$ . Para todos os casos, fazemos  $n = t$  com valores inteiros de  $t$ .

A Fig. 11 mostra que  $Q(t)$  e  $E(t)$  escalam com  $N$ , corroborando os resultados pelos demais métodos, a condição de ergodicidade não é atingida no limite  $N \rightarrow \infty$ .

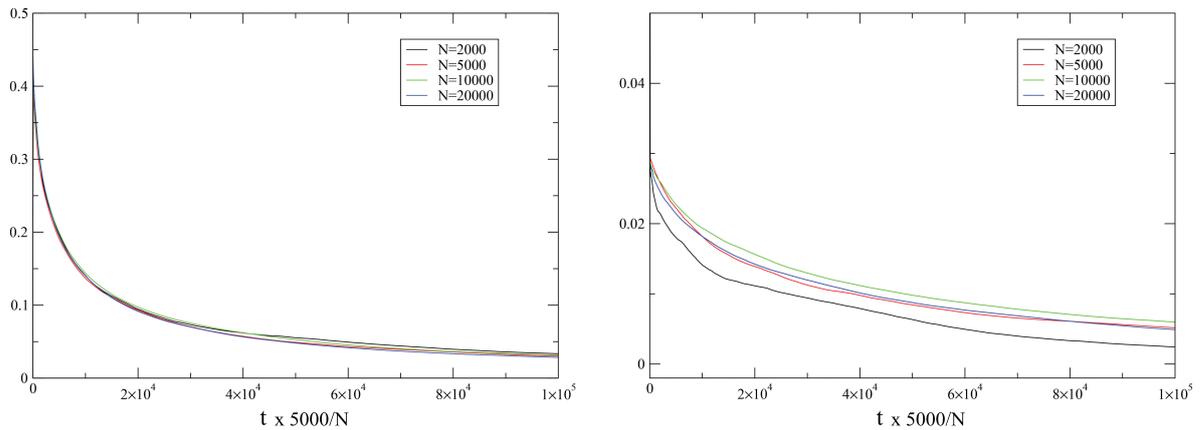


Figura 11: Gráficos são os mesmos, respectivamente, das Figs. 10a e 9a, mas com o tempo reescalando com  $t \rightarrow t \times N/5000$  em ambos casos. Para o caso homogêneo (gráfico da esquerda) os dados são muito bons, enquanto para o caso não-homogêneo, temos uma aproximação.

## 5.3 Propriedades de Ergodicidade em sistemas unidimensionais

Analisamos o critério de ergodicidade por três abordagens distintas: analisando a evolução do desvio padrão da média temporal das velocidades das partículas, pela estatística dos tempos de visitação em células no espaço dos momentos utilizando a abordagem de Rebenshtok e Barkai [45] e pelo método do funcional dinâmico[47, 48, 49].

### 5.3.1 Análise da ergodicidade pela abordagem da dispersão nas médias temporais das velocidades de cada partícula

Para o sistema autogravitante em uma dimensão, cujo potencial é solução da equação de Poisson (2.4) para uma única dimensão e, portanto,  $V(x) = |x|$ , com o

fator de Kac  $\frac{1}{N}$  analisamos a ergodicidade pela abordagem da dispersão nas médias temporais das velocidades de cada partícula para diferentes números de partículas  $N = 2048$ ,  $N = 4096$  e  $N = 8192$ . As simulações são para um tempo total  $t_f = 1000$  com passo de tempo  $dt = 0.01$ , distribuição inicial uniforme (waterbag) no intervalo  $[-p_0, p_0]$  com  $p_0 = 10.0$  e  $[-r_0, r_0]$  com  $r_0 = 10.0$ .

Mostramos o desvio padrão da média temporal das componente  $x$  do momento e posição como definido pelas Eqs. (3.45) e (3.46):

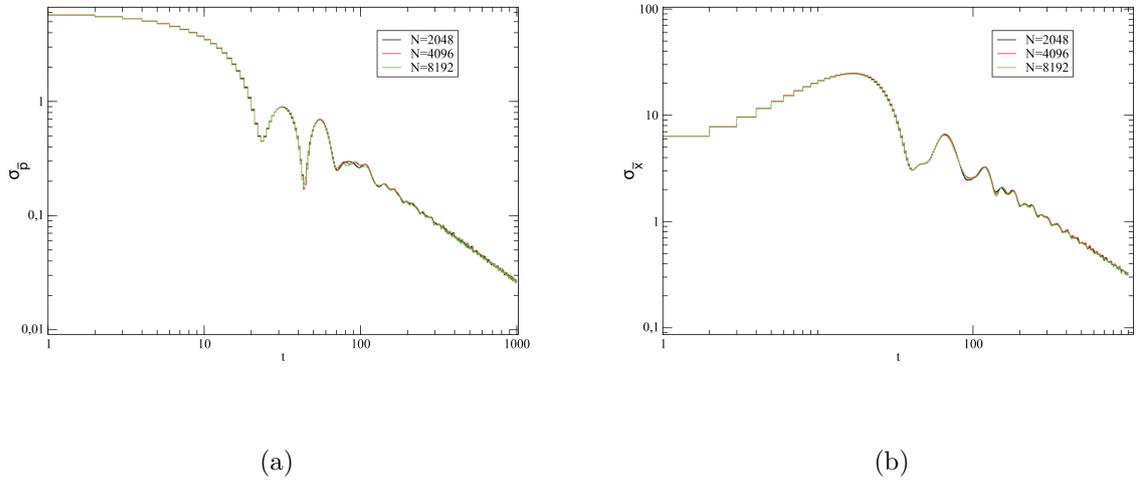


Figura 12: a) Desvio padrão na Eq. (3.45) para as variáveis  $\overline{p_x}$  de cada partícula para o sistema autogravitante em uma dimensão, com passo de tempo  $\Delta t = 0.01$ . b) Desvio padrão de  $\overline{x}$ . O fitting para a cauda de  $\sigma_{\overline{p_x}}(t)$  para  $N = 2048$  é dado por  $25.8 \times t^{-0.99}$ , para  $N = 4096$  é  $26.4 \times t^{-0.99}$  e, para  $N = 8192$  é dado por  $26.0 \times t^{-0.99}$ , já o fitting para a cauda de  $\sigma_{\overline{x}}(t)$  é, para  $N = 2048$ ,  $303.4 \times t^{-0.99}$ , para  $N = 4096$  é  $294.2 \times t^{-0.99}$  e  $287.4 \times t^{-0.99}$  para  $N = 8192$ .

Observamos também, na Fig.13 os desvios padrão para o sistema nas mesmas condições que na Fig. 12, exceto pelo valor do momento inicial, que neste caso foi  $p_0 = 3.14$  a fim de obedecer a condição de virialização (??).

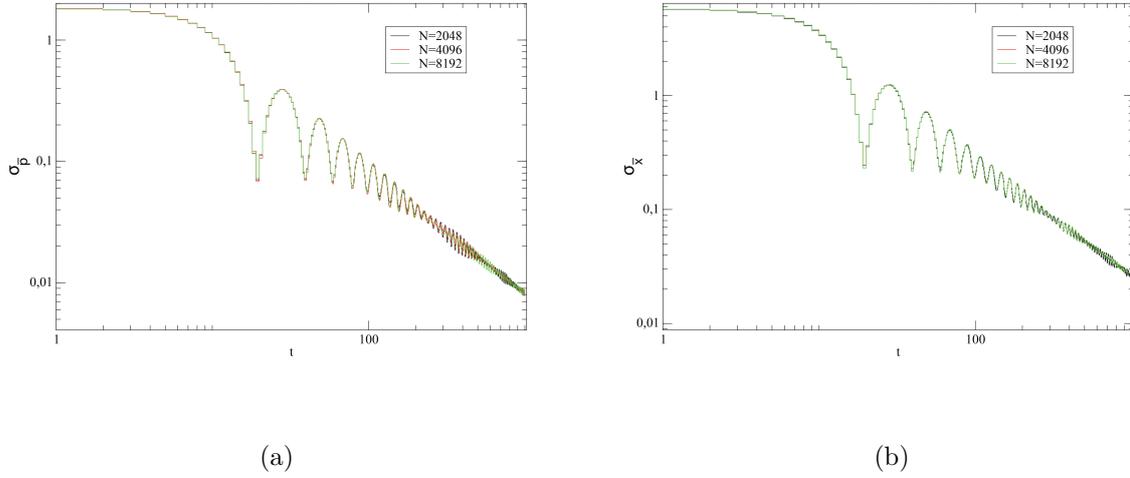


Figura 13: a) Desvio padrão na Eq. (3.45) para as variáveis  $\bar{p}_x$  de cada partícula para o sistema autogravitante em uma dimensão, com passo de tempo  $\Delta t = 0.01$ . b) Desvio padrão de  $\bar{x}$ . O fitting para a cauda de  $\sigma_{\bar{p}_x}(t)$  para  $N = 2048$  é dado por  $25.8 \times t^{-0.99}$ , para  $N = 4096$  é  $26.4 \times t^{-0.99}$  e, para  $N = 8192$  é dado por  $26.0 \times t^{-0.99}$ , já o fitting para a cauda de  $\sigma_{\bar{x}}(t)$  é, para  $N = 2048$ ,  $303.4 \times t^{-0.99}$ , para  $N = 4096$  é  $294.2 \times t^{-0.99}$  e  $287.4 \times t^{-0.99}$  para  $N = 8192$ .

O fato do sistema se tornar ergódico apenas assintoticamente pode, pelo menos em parte, explicar a falha da teoria de relaxação violenta de Lynden-Bell, que por sua vez pressupõe um estado de mixing completo, ou seja, considera o sistema ergódico.

### 5.3.2 Análise de ergodicidade pela estatística dos tempos de visitação em células no espaço dos momentos

Analisamos a ergodicidade do sistema autogravitante em uma dimensão também pelo critério da estatística dos tempos de visitação em células do espaço dos momentos, conhecido como método do *sojourn time*, para diferentes números de partículas  $N = 2048$ ,  $N = 4096$  e  $N = 8192$ . As simulações são para um tempo total  $t_f = 1\,000$  com passo de tempo  $dt = 0.2$ , momento inicial  $p_0 = 10.0$ , posição

inicial  $r_0 = 10.0$  e as células do momento de extensão  $\Delta p = 0.5$ .

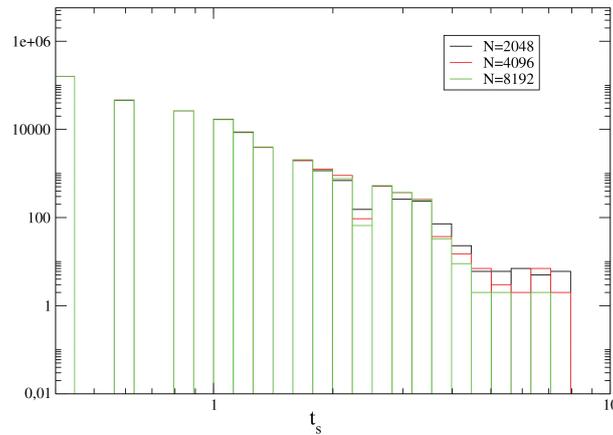


Figura 14: Histograma de frequência dos tempos de visita no espaço dos momentos para sistema autogravitante para diferentes números de partículas  $N = 2048$ ,  $N = 4096$  e  $N = 8192$ . As simulações são para um tempo total  $t_f = 1\,000$  com passo de tempo  $dt = 0.2$ , momento inicial  $p_0 = 10.0$ , posição inicial  $r_0 = 10.0$  em uma dimensão com células do espaço dos momentos com comprimento de  $\Delta p = 0.5$ .

Para  $p_0 = 3.14$ , a condição do Virial (??) é atendida e para tal caso obtivemos o resultado abaixo na Fig. 15:

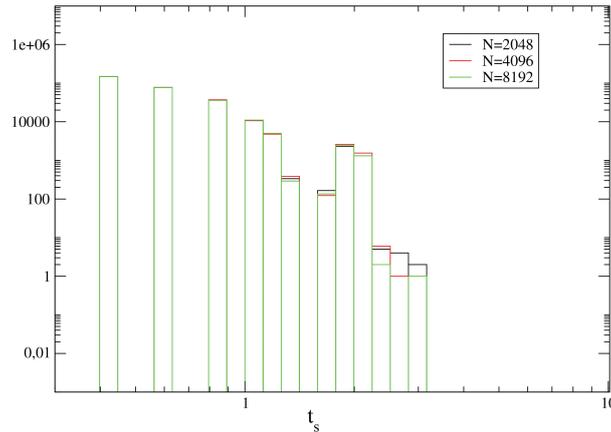


Figura 15: Histograma de frequência dos tempos de visitaçao no espaço dos momentos para sistema autogravitante em uma dimensao com  $p_0 = 3.14$  e as demais condições são as mesmas usadas na Fig. 14.

### 5.3.3 Análise de ergodicidade pelo método do funcional dinâmico

Para o modelo de soma de Ewald [50], fizemos simulações a fim de obter o comportamento das funções  $E(n)$  e  $Q(n)$  para analisarmos seus aspectos de *mixing* e ergodicidade. O fizemos para diferentes números de partículas,  $N = 2048$ ,  $N = 4096$  e  $N = 8192$ . O sistema evolui por um tempo total  $t_f = 1\,000$ , com um passo de tempo  $dt = 0.001$  e sendo  $L$  a metade do período em que é distribuída a densidade de massa  $L = 10.0$ . Consideramos uma distribuição inicial uniforme no intervalo  $[-p_0, p_0]$  com  $p_0 = 10.0$  e  $[-r_0, r_0]$  com  $r_0 = 10.0$ . Os resultados serão mostrados e discutidos a seguir.

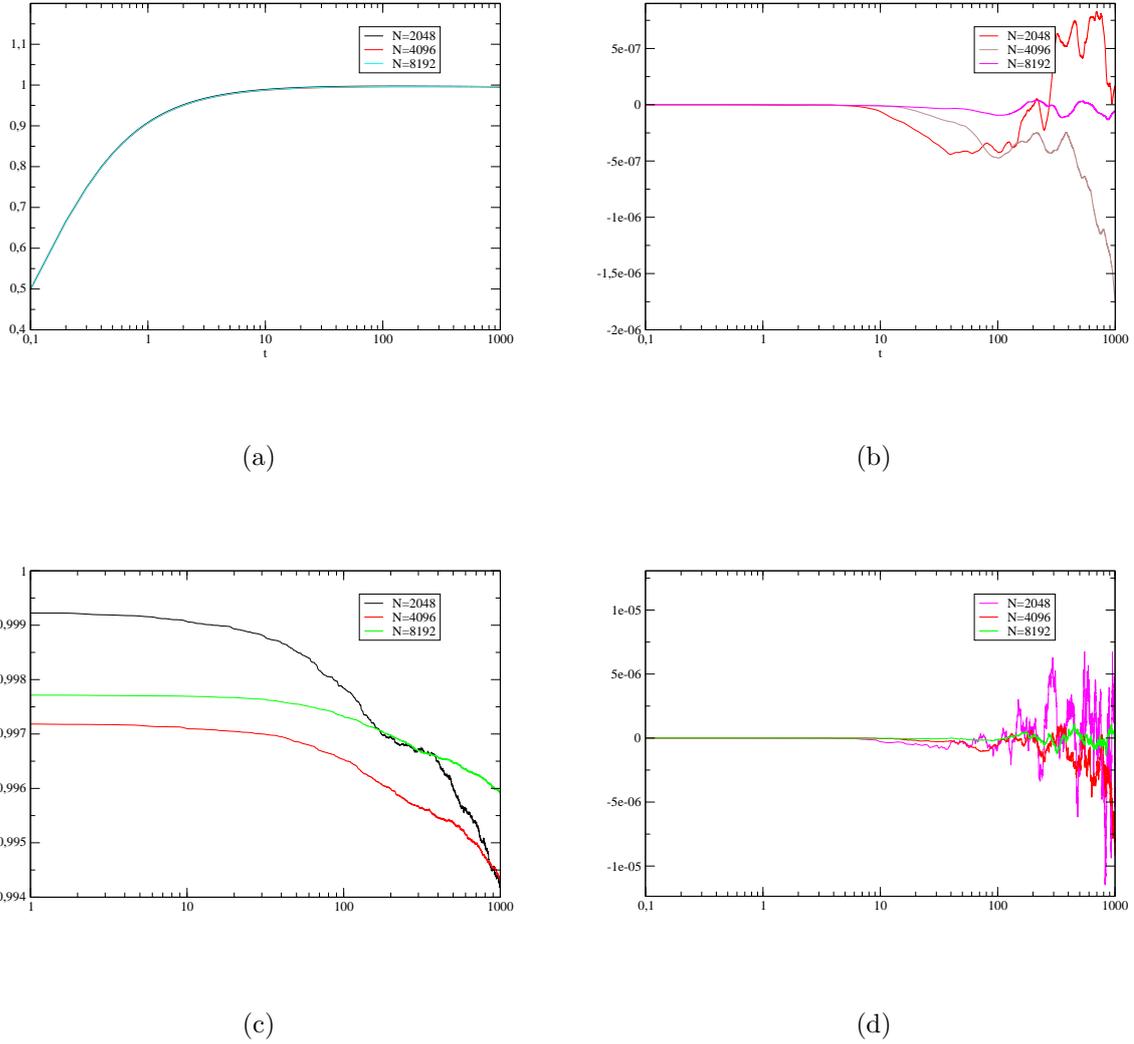


Figura 16: Partes real e imaginária de  $Q(n)$  e  $E(n)$  nas Eq. (3.59) e (3.66) para o modelo de soma de Ewald e número de partículas  $N = 2048, 4096$  e  $8192$  para o momento como a variável estocástica. a)  $\text{Re}[Q(t)]$ ; b)  $\text{Im}[Q(t)]$ ; c)  $\text{Re}[E(t)]$ ; d)  $\text{Im}[E(t)]$ . Para todos os casos, fazemos  $n = t$  com valores inteiros de  $t$  e  $L=10.0$

É interessante notar que para o caso da Fig. 16 o critério de ergodicidade não é obedecido, o que é esperado, dado que o sistema está em condições que o tornam homogêneo, de modo tal que o fator colisional entre as partículas é nulo e, portanto, não há dinâmica. Essa característica é corroborada observando os gráficos da energia

na Fig.17, a qual é constante (aproximadamente, algumas pequenas variações se devem ao erro intrínseco da simulação numérica), e o gráfico da distribuição de partículas no espaço de fase, os quais são mostrados a seguir para  $N = 2048$ .

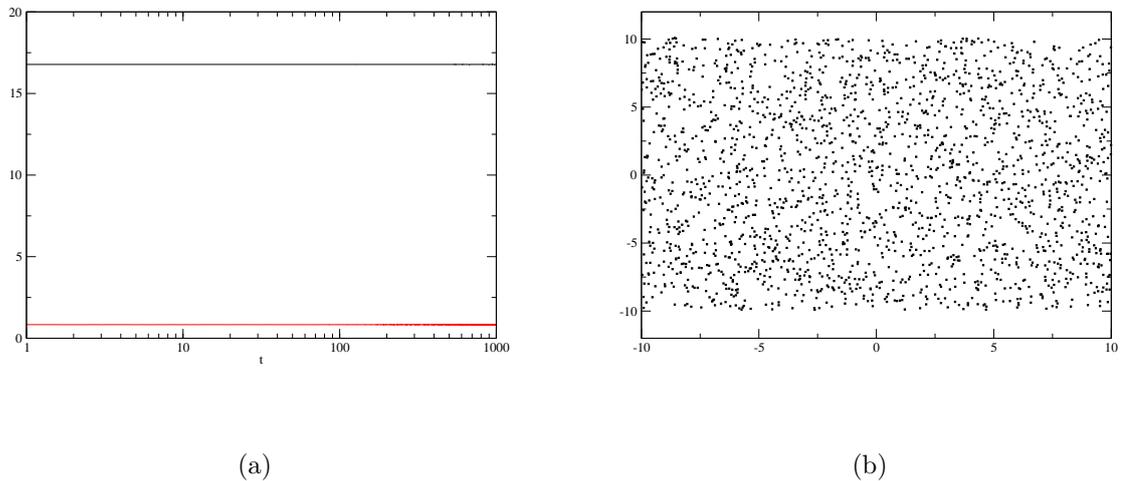
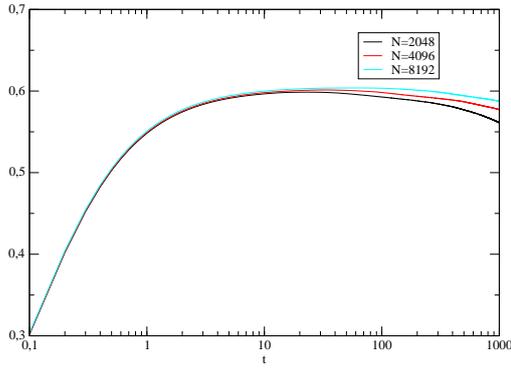
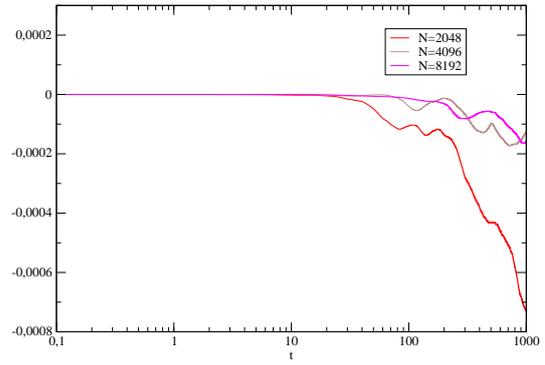


Figura 17: a) Energia e b) distribuição das partículas no espaço de fase para o sistema nas mesmas condições da Fig. 16 mas apenas para  $N = 2048$ .

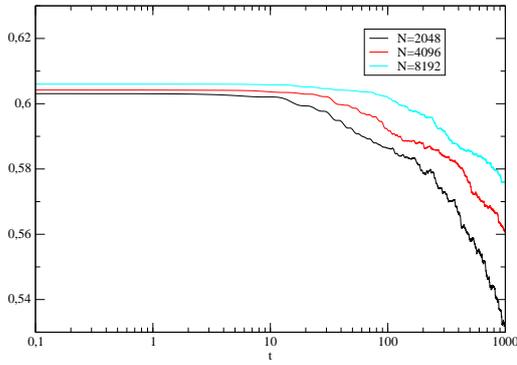
Virializamos, fazendo  $p_0 = 1.58$ , o sistema para as condições da Figs. 16 e obtivemos os seguintes resultados na Fig. (18) para as funções 3.59 e 3.66:



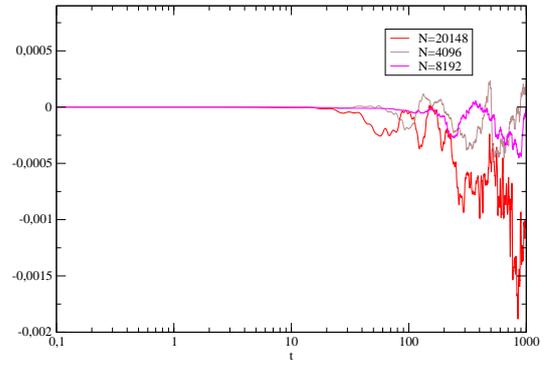
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 18: Partes real e imaginária de  $Q(n)$  e  $E(n)$  nas Eq. (3.59) e (3.66) para o modelo de soma de Ewald e número de partículas  $N = 2048, 4096$  e  $8192$  para o momento como a variável estocástica para o caso virializado. a)  $\text{Re}[Q(t)]$ ; b)  $\text{Im}[Q(t)]$ ; c)  $\text{Re}[E(t)]$ ; d)  $\text{Im}[E(t)]$ . Para todos os casos, fazemos  $n = t$  com valores inteiros de  $t$  e  $L=10.0$

Nota-se, analisando a Fig.18, mais uma vez, corroborando o resultado exposto na Fig. 16, que o critério de ergodicidade não é obedecido, pois trata-se de um sistema homogeneizado, o que podemos observar analisando o gráfico da energia e

da distribuição de partículas no espaço de fase para 2048 partículas (Fig. 19):

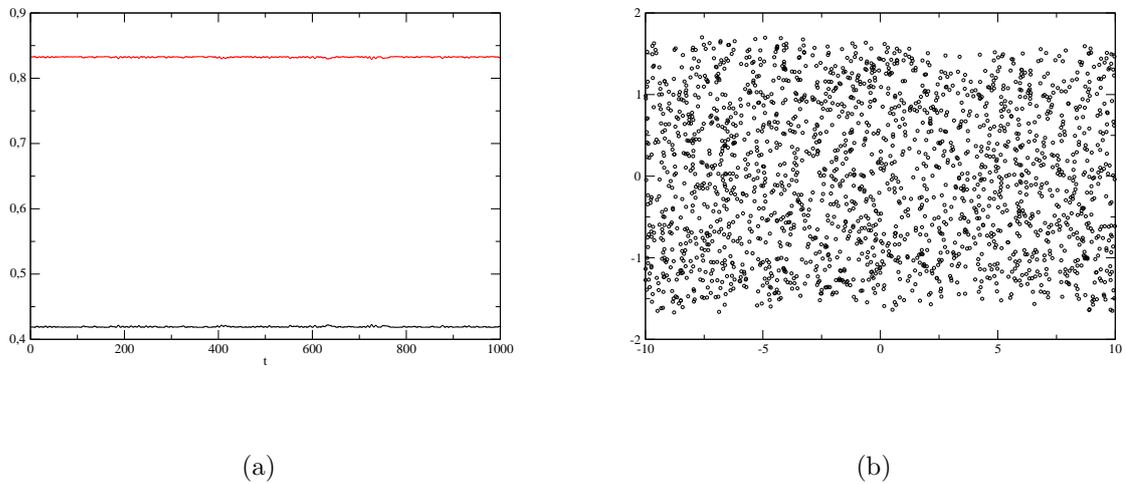


Figura 19: a) Energia e b) distribuição das partículas no espaço de fase para o sistema nas mesmas condições da Fig. 18 mas apenas para  $N = 2048$ .

Ainda para soma de Ewald, fizemos simulações para as mesmas condições da Fig. 16, exceto pelo tamanho de  $L$ , pois tomamos  $L \rightarrow \infty$ , computacionalmente usamos  $L = 10^{20}$ , o que anula a parte periódica do potencial da eq. 4.1, levando-o ao simples potencial para sistemas gravitacionais em uma dimensão, solução da eq.(2.4) sem condições de contorno periódicas. Tais simulações levaram aos seguintes resultados (Fig. 20) para as funções  $Q(n)$  e  $E(n)$  do funcional dinâmico das eqs. 3.59 e 3.66 :

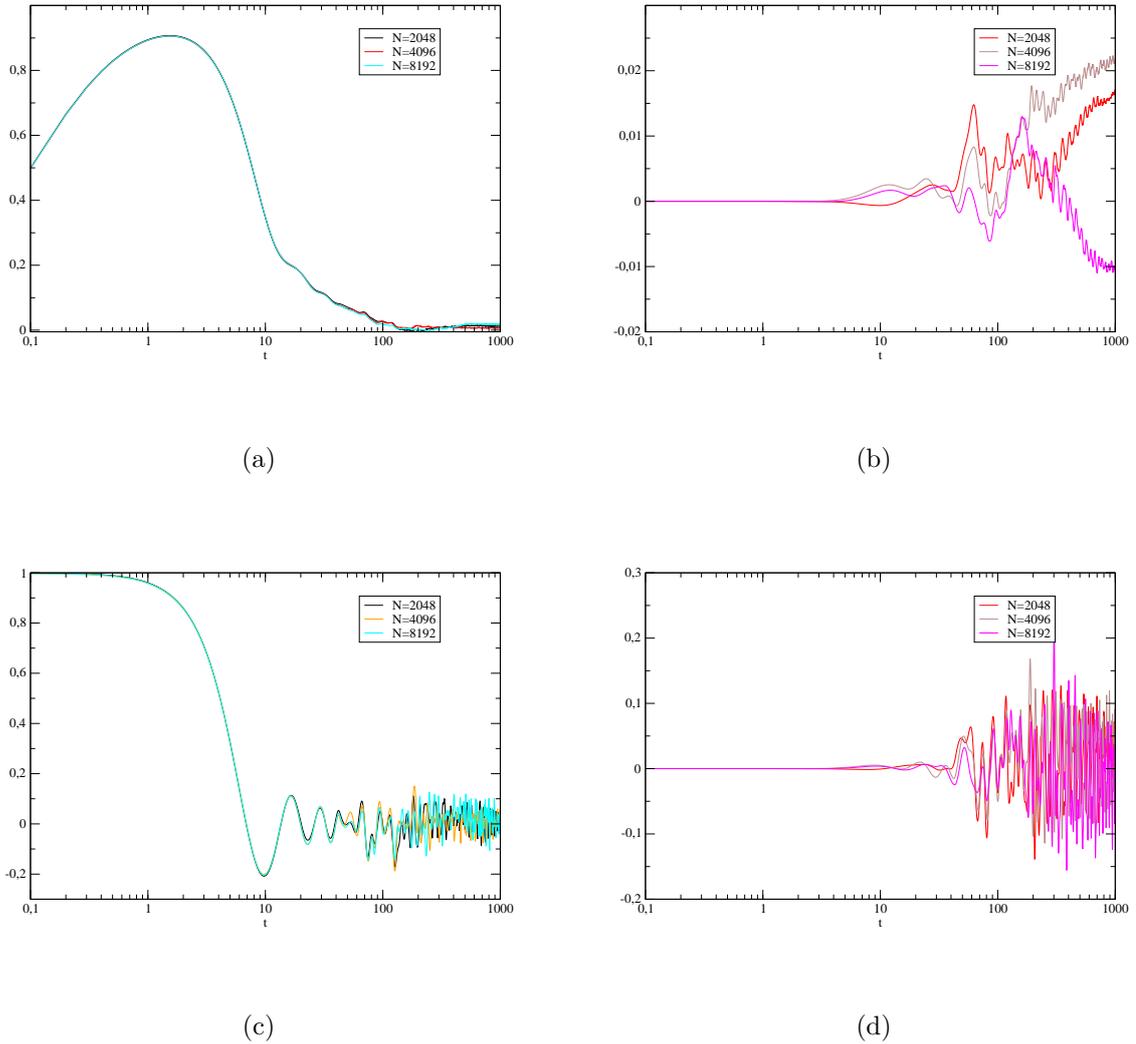


Figura 20: Partes real e imaginária de  $Q(n)$  e  $E(n)$  nas Eq. (3.59) e (3.66) para o modelo de soma de Ewald e número de partículas  $N = 2048, 4096$  e  $8192$  para o momento como a variável estocástica. a)  $\text{Re}[Q(t)]$ ; b)  $\text{Im}[Q(t)]$ ; c)  $\text{Re}[E(t)]$ ; d)  $\text{Im}[E(t)]$ . Para todos os casos, fazemos  $n = t$  com valores inteiros de  $t$  e  $L = 10^{20}$ .

A fim de comparar com o sistema com  $L = 10$ , observamos também a energia e distribuição das partículas no espaço de fase para  $N = 2048$  na Fig. (21):

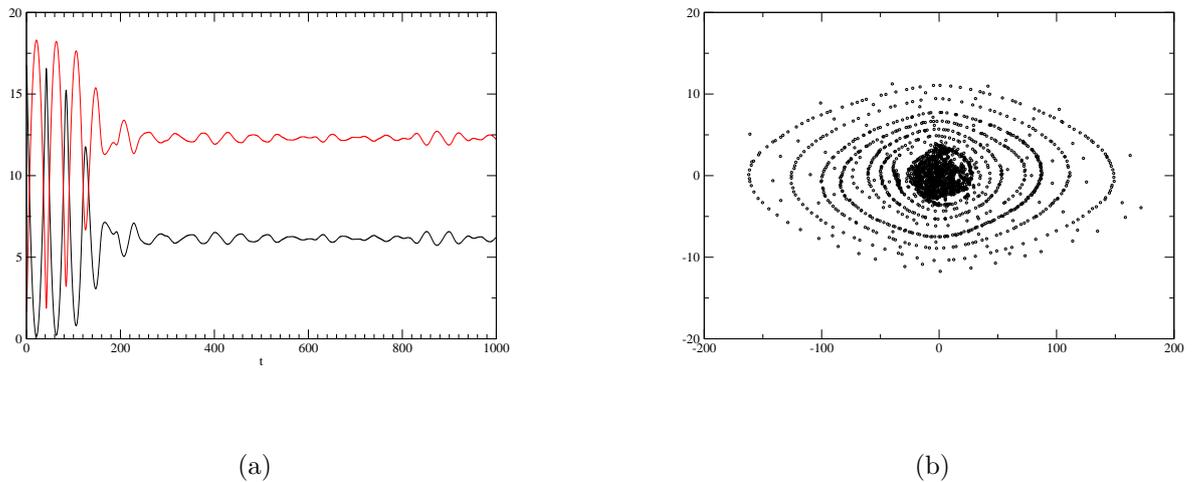
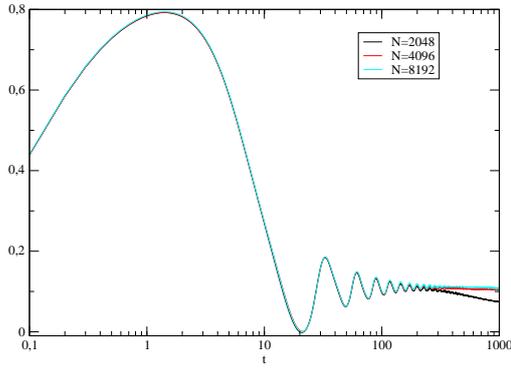


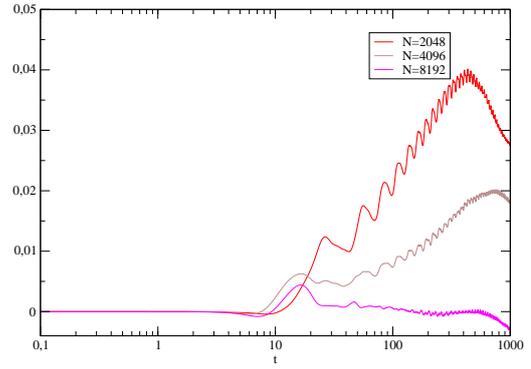
Figura 21: a) Energia e b) distribuição das partículas no espaço de fase para o sistema nas mesmas condições da Fig. 20 mas apenas para  $N = 2048$ .

Assim, podemos observar pelos resultados da Fig. 21 mostram que para as condições em questão, sobretudo o tamanho de  $L$ , que os distinguem dos resultados da Fig. 17, permitem que o sistema evolua com uma relaxação violenta inicial e atinja o estado quase estacionário, a distribuição das partículas no espaço de fase mostra que o sistema não é homogêneo e que há dinâmica nele.

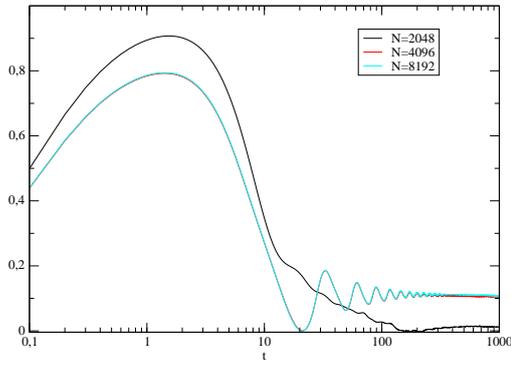
Com o sistema virializado ( $p_0 = 2.23$ ) para  $L = 10^{20}$ , obtivemos os seguintes resultados da Fig. (22) para  $Q(n)$  e  $E(n)$ :



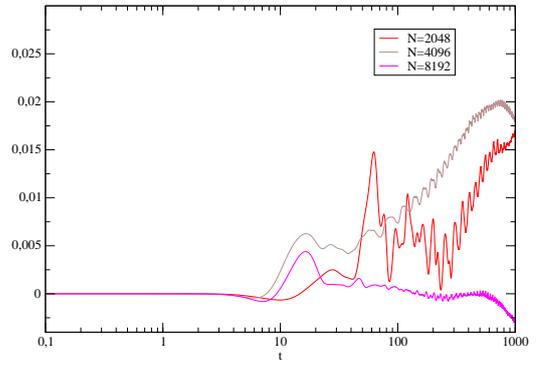
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 22: Partes real e imaginária de  $Q(n)$  e  $E(n)$  nas Eq. (3.59) e (3.66) para o modelo de soma de Ewald e número de partículas  $N = 2048, 4096$  e  $8192$  para o momento como a variável estocástica para o caso virializado. a)  $\text{Re}[Q(t)]$ ; b)  $\text{Im}[Q(t)]$ ; c)  $\text{Re}[E(t)]$ ; d)  $\text{Im}[E(t)]$ . Para todos os casos, fazemos  $n = t$  com valores inteiros de  $t$  e  $L = 10^{20}$ .

Observamos também a energia e distribuição das partículas no espaço de fase para  $N = 2048$  na Fig.(23):

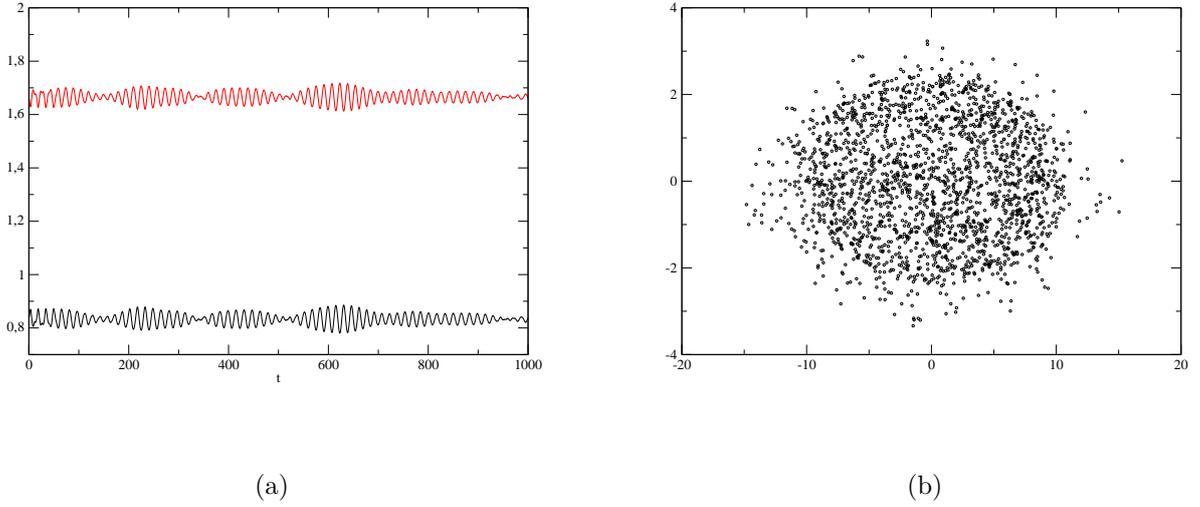


Figura 23: a) Energia e b) distribuição das partículas no espaço de fase para o sistema nas mesmas condições da Fig. 22 mas apenas para  $N = 2048$ .

Em nossa análise, verificamos, portanto, que para o sistema não-homogêneo o critério de ergodicidade tende a ser obedecido para os diferentes números de partículas  $N$ , ainda que para intervalos de tempo longos.

## 5.4 Propriedades de Ergodicidade em sistemas autogravitantes bidimensionais

Procedemos o estudo de ergodicidade em sistemas autogravitantes bidimensionais [61],[59] com  $N$  partículas idênticas, cuja Hamiltoniana pode ser escrita como [62]:

$$H = \sum_{k=1}^N \frac{p_k^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{k,l=1}^N \ln(|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l| + \epsilon), \quad (5.7)$$

em que o potencial logaritmico é a solução da equação de Poisson em duas dimensões(2.4) [62], as massas são tomadas como unitárias e  $\epsilon$  é um pequeno parâmetro, usado em simulações de sistemas autogravitantes com a finalidade de impedir

a divergência do potencial à distância muito pequena [55]. Utilizamos o chamado fator de Kac  $1/N$  no potencial para tornar a energia extensiva (embora não aditiva), que conduz à reescala de tempo  $t \rightarrow t/\sqrt{N}$ .

Uma importante característica deste potencial é o fato de ser confinante, o que evita o problema de evaporação de partículas que ocorre em sistemas autogravitantes tridimensionais.

Consideramos uma condição inicial com partículas distribuídas no espaço de maneira uniforme em uma faixa circular cujos raios interno e externo são, respectivamente,  $R_1 = 40.0$  e  $R_2 = 50.0$  e uma distribuição uniforme (waterbag) para o momento em um intervalo  $-p_0 < p < p_0$  com  $p_0 = 0.5$ . O sistema evolui por um tempo total  $t_f = 10\,000$  em que tem alcançado o QSS, o qual é utilizado como condição inicial para os diferentes testes realizados, cujos resultados serão mostrados e discutidos a seguir.

#### 5.4.1 Análise da ergodicidade pela abordagem da dispersão nas médias temporais das velocidades de cada partícula

A Figura 24 mostra a Kurtose da distribuição de momentos, definida por  $\mathcal{K} \equiv \langle p^4 \rangle / \langle p^2 \rangle^2$ , para os valores de  $N$  usados em nossas simulações, explicitando que o estado estatístico do sistema é estacionário.

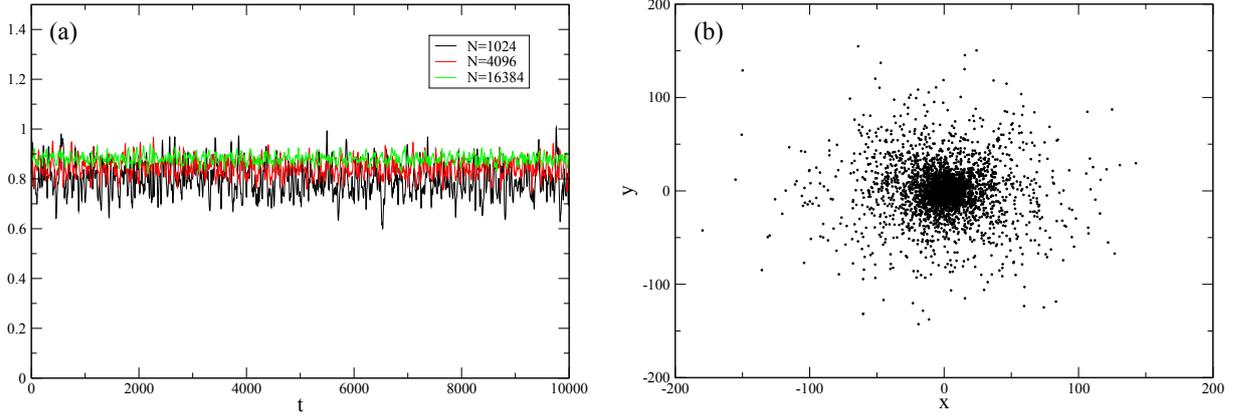


Figura 24: a) Kurtose para a distribuição de momentos como uma função do tempo para os valores  $N$  para sistema autogravitante em duas dimensões. b) Posições das partículas na configuração usada como condição inicial para simulações para  $N = 4096$ .

O desvio padrão da média temporal das componente  $x$  do momento e posição como definido pelas Eqs. (3.45) e (3.46), respectivamente, são mostrados na Fig. 25a. A média da velocidade térmica é de ordem  $\bar{v} \sim 1$ , e um tempo de travessia pode ser definido como o tempo em que a partícula com velocidade térmica atravessa a extensão  $L_{qss}$  do core-halo QSS da estrutura formada depois da relaxação violenta, como mostrado pela Fig. 24b. Por verificação, obtemos  $L_{qss} \approx 200$ , cujo valor não varia de forma significativa com  $N$  e o tempo. Assim, o tempo de travessia, neste caso, pode ser escrito como  $t_{cr} = L_{qss}/\bar{v} \approx 200$ .

Os gráficos de  $\sigma_{\bar{p}_x}(t)$  e  $\sigma_{\bar{x}}(t)$  coincidem depois de decorrido certo intervalo de tempo para todos os valores testados de  $N$ . Este comportamento é observado também para sistemas autogravitantes em uma dimensão, conforme mostrado nos correspondentes resultados. Tal comportamento indica que o tempo para que a ergodicidade seja atingida é o mesmo para todo valor de  $N$  e que sistemas autogravitantes bidimensionais são ergódicos mesmo no limite  $N \rightarrow \infty$ . A lei de potência de decai-

mento da dispersão de  $\bar{p}_x$  pode ser explicada pelo fato de que a dispersão final da distância percorrida na direção  $x$ ,  $\sqrt{\sum_k [x_k(t) - x_k(0)]^2/N}$ , é independente de  $N$  e constante no tempo, o que indica que o expoente  $\mu$  na Eq. (3.49) tende a zero após a relaxação violenta. Eq. (3.50) indica que  $\sigma_{\bar{p}_x}$  é proporcional a  $t^{-1}$  como na Fig. 25.

Para explicar a independência de  $\sigma_{\bar{p}_x}(t)$  em  $N$  notamos que seu tempo de evolução é decorrente de flutuações da força (para  $N$  finito) [63, 64, 65]. As estatísticas de flutuações da força de sistemas autogravitantes em três dimensões foram primeiramente obtidas por Chandrasekhar [64] e para uma e duas dimensões, por Chavanis [66]. Chavanis mostrou que a flutuação da força escala com a densidade de massa, que é proporcional a  $N$ . Uma vez que ele não usa o fator de Kac em suas expressões, concluímos que para o potencial da Eq. (5.7) as flutuações da força são independentes de  $N$ , o mesmo vale para  $\sigma_{\bar{p}_x}(t)$ . Em nosso caso, se o fator de Kac não for utilizado, então o tempo necessário para o sistema ser ergódico diverge com  $\sqrt{N}$ , i. e. o sistema é estritamente não-ergódico somente no limite de  $N \rightarrow \infty$ . Com o fator de Kac o sistema é sempre ergódico, embora seja necessário um tempo considerável para isso. Notamos também que a escala de  $\sigma_{\bar{p}_x}$  com  $N$  não é a mesma para a dinâmica da função de distribuição de uma partícula, que escala com  $N$ .

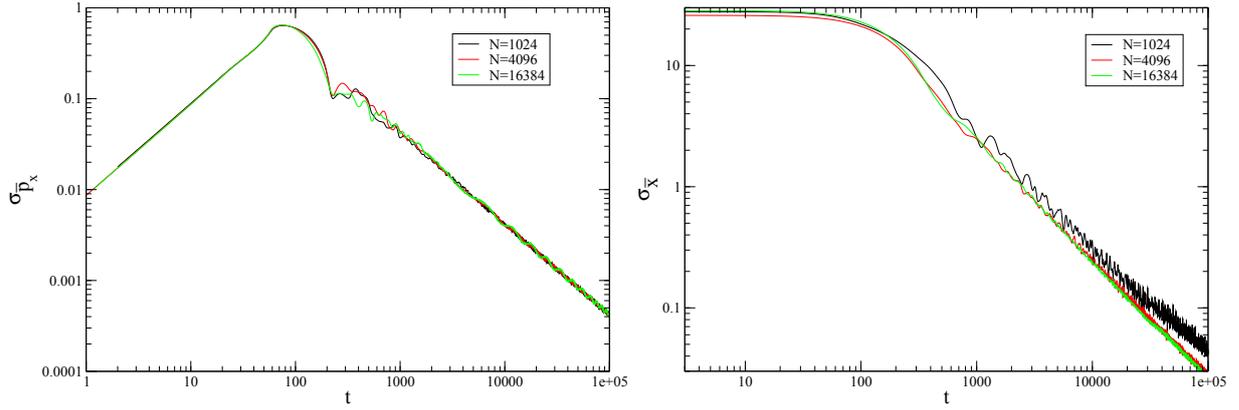


Figura 25: a) Desvio padrão na Eq. (3.45) para as variáveis  $\bar{p}_x$  de cada partícula para o sistema autogravitante bidimensional, com passo de tempo de integração  $\Delta t = 0.05\epsilon = 10^{-3}$ . b) Desvio padrão de  $\bar{x}$ . O fitting para a cauda de  $\sigma_{\bar{p}_x}(t)$  é dado por  $48.4 \times t^{-1.02}$  e  $2271 \times t^{-0.99}$  for  $\sigma_{\bar{x}}(t)$ .

### 5.4.2 Análise de ergodicidade pela estatística dos tempos de visitação em células no espaço dos momentos

Os tempos de sojourn são obtidos dividindo o espaço dos momentos em células de mesmo tamanho cujo comprimento é fixo, associado a estados discretos. Inicialmente, consideramos as componentes  $x$  do momento e posição das células de comprimentos  $\Delta x = 0.2$  and  $\Delta p_x = 0.2$ , respectivamente. A Fig. 26 mostra os histogramas de frequência para os tempos de sojourn  $t_s$ , que é truncado. Esta truncatura é como a comumente esperada para sistemas finitos, a qual não varia de forma significativa com relação a  $N$ .

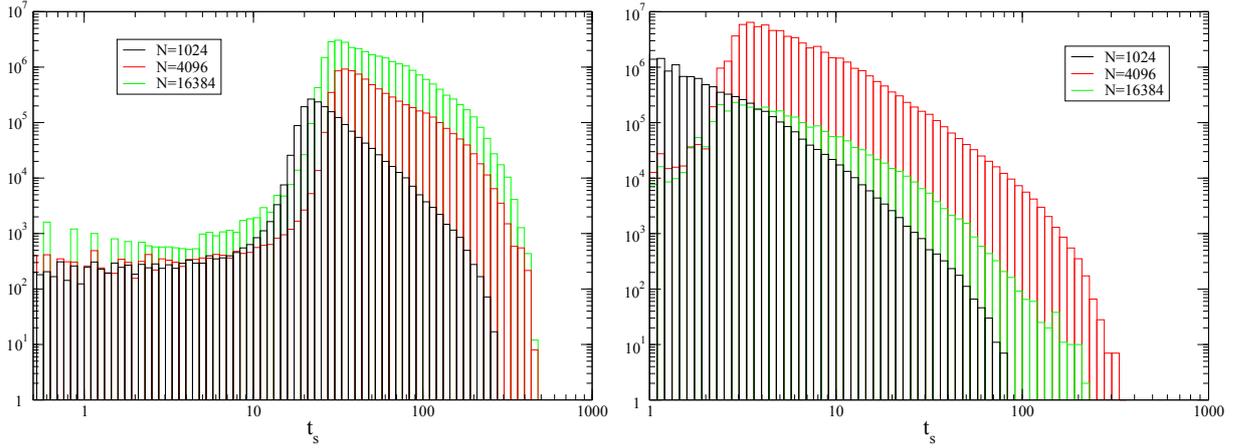


Figura 26: a) Tempos de visitação para células com comprimento  $\Delta p_x = 0.2$  na componente  $x$  do momento no espaço dos momentos para sistema autogravitante em duas dimensões para alguns distintos valores  $N$  com um tempo total de simulação  $t_f = 10^4$ . b) O mesmo que (a) mas para células de comprimento  $\Delta x = 0.2$  na componente  $x$  da posição e tempo total de simulação  $t_f = 10^5$ .

### 5.4.3 Análise de ergodicidade pelo método do funcional dinâmico

Para o funcional dinâmico obtivemos os resultados representados nas Figuras 27 e 28, as quais mostram  $Q(n)$  e  $E(n)$ , dado que  $n = t$  para valores inteiros de  $t$ . Em todos os casos observados as Eqs. (3.59) e (3.66) são satisfeitas apenas após decorrido um intervalo de tempo muito longo, que, a grosso modo, é o mesmo para todos valores de  $N$ , em consonância com os resultados obtidos pelos outros métodos.

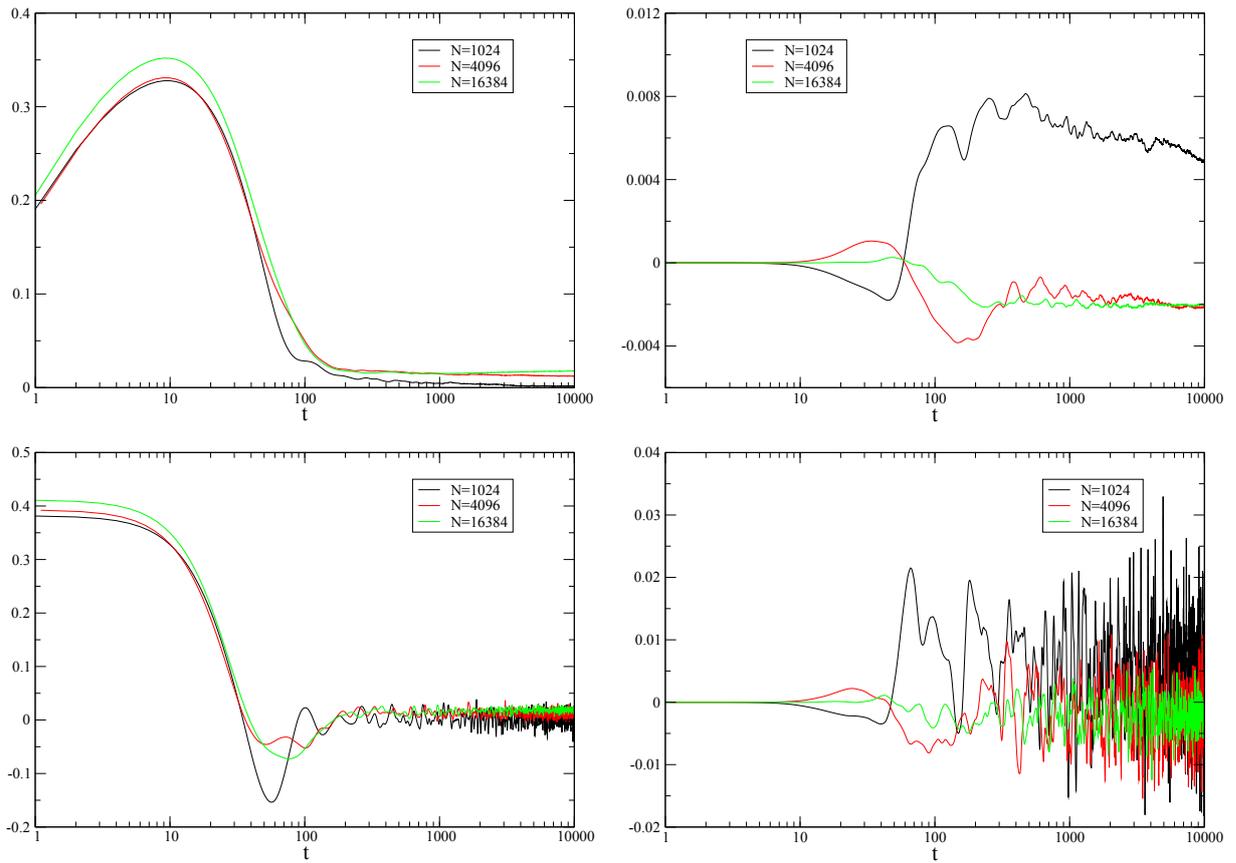


Figura 27: a) Partes real e b) imaginária de  $Q(n)$  na Eq. (3.59) Para a mesma simulação e número de partículas  $N$  que o representado na Fig. 26 para a componente real  $x$  do momento como a variável estocástica para o sistema autogravitante bidimensional. c) Partes real e d) imaginária de  $E(n)$  na Eq. (3.66).

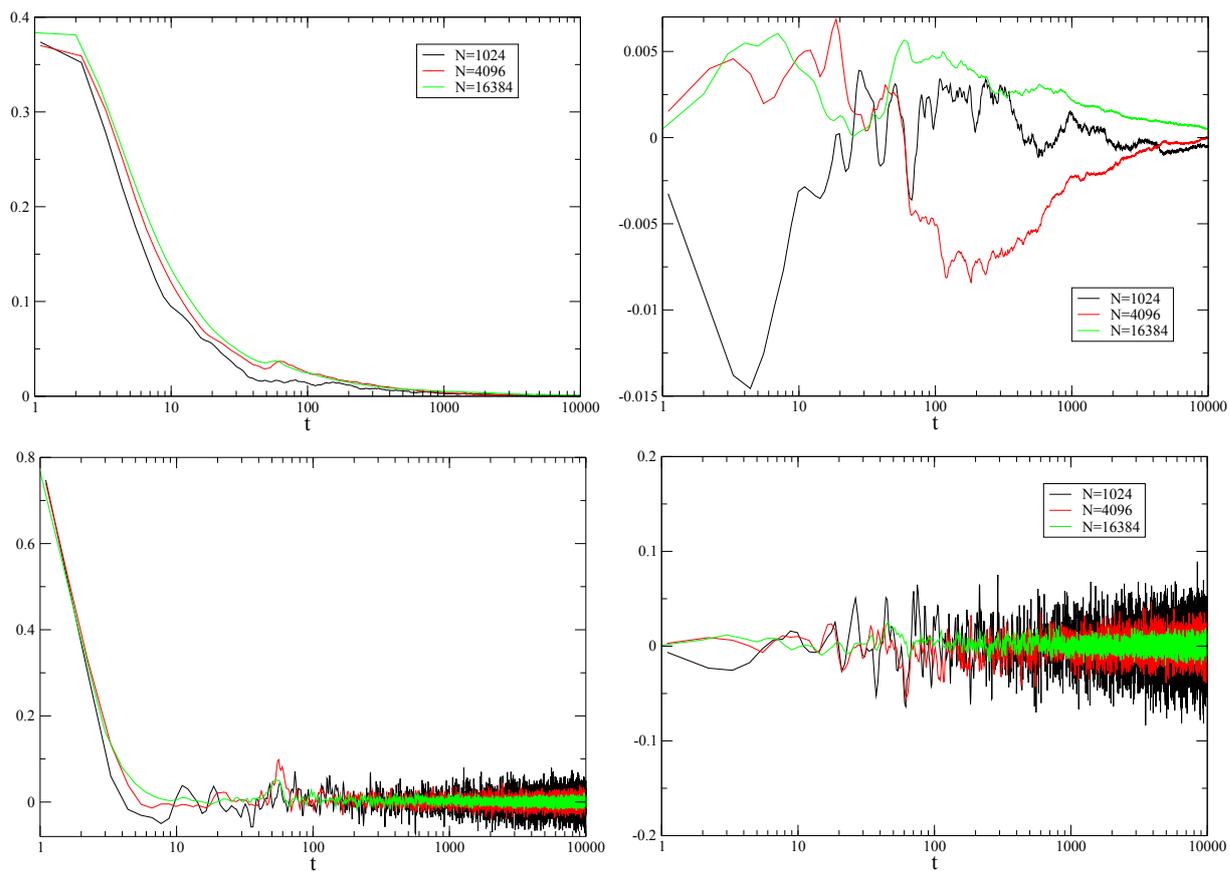


Figura 28: O mesmo que a Fig. 27 mas para a componente  $x$  da posição como variável estocástica.

## 6 Conclusão

Obtivemos resultados para sistemas autogravitantes em uma e duas dimensões. Para fins de comparação obtivemos também resultados para o modelo HMF, o que evidenciou que esses sistemas são ergódicos e obedecem ao critério de *mixing*, embora seja importante destacar que para o modelo HMF essa afirmação se sustenta apenas se o número de partículas  $N$  do sistema for finito, uma vez que o tempo necessário para que o critério de ergodicidade seja obedecido diverge com o valor de  $N$ . Por outro lado, para os sistemas autogravitantes, a escala de tempo se mostra independente de  $N$ . Tal aspecto pode estar relacionado ao caráter confinante do potencial de interação entre as partículas. É interessante também salientar que caso o fator de Kac não seja utilizado no potencial, o tempo para a ergodicidade diverge com o crescimento de  $N$ .

Dentre os métodos de análise de ergodicidade, o método direto e o método do funcional dinâmico mostram-se ferramentas importantes para a investigação do critério de ergodicidade para sistemas autogravitantes, por outro lado, o método dos tempos de visitaç o (tempos de *sojourn*) produziu resultados ambíguos, como a cauda da sua distribuição é muito curta dificulta uma análise eficiente, para levar a resultados satisfatórios é necessária uma melhor estatística o que demanda um maior custo computacional em relação aos demais métodos.

Deduzimos a construção de Maxwell em longo alcance para o modelo do Anel e

---

corroboramos a inequivalência de ensembles para esse modelo.

Assim o trabalho contribuiu com os referidos resultados até então não obtidos para os sistemas em questão no que diz respeito a descrição da propriedade de ergodicidade sob três abordagens distintas além de deduzirmos a construção de Maxwell em longo alcance. Abre-se uma gama de possibilidades de trabalhos a serem desenvolvidos nessa linha analisando, sobretudo, os aspectos que abordamos para outros tipos de sistemas, inclusive autogravitante em três dimensões, que são mais complexos de ser estudados em virtude da evaporação de partículas em decorrência de seu potencial não confinante.

## APÊNDICE A – Algoritmos numéricos utilizados

### A.1 Integrador simplético

Reproduzimos aqui o algoritmo em C para o integrador simplético baseado no descrito em [17] de Yoshida, utilizado para a simulação dos sistemas com  $N$  corpos mutualmente autogravitantes em duas dimensões. Os trechos precedidos por C são nossos comentários acerca dos passos do programa:

```

IMPLICIT NONE

COMMON R,P,F,N

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

INCLUDE 'dimmax.inc'

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

COMMON /SMOOTH/ EPS

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

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

```

```
.          D0 =  1.35120719195965763 ,
.          D1 = -1.70241438391931525)
OPEN(UNIT=12,FILE='data.in',STATUS='OLD')
READ(12,*) INTEG
READ(12,*) DT
READ(12,*) TF
READ(12,*) TS
READ(12,*) N
READ(12,*) EPS
READ(12,*) R1
READ(12,*) R2
READ(12,*) K0
READ(12,*) SEED
READ(12,*) SEQ
READ(12,*) TRELAX
READ(12,*) DTSUM
READ(12,*) SAVINT
CLOSE(12)
PRINT *, ' '
PRINT *, '===== '
PRINT *, 'DT, TF, TS = ',DT,TF,TS
PRINT *, 'N = ',N
PRINT *, 'SEED= ',SEED
PRINT *, 'SEQ,TRELAX= ',SEQ,TRELAX
PRINT *, '===== '
PRINT *, ' '
PRINT *, ' '
PRINT *, 'Preparing the initial condition...'
```

```
CALL CONDINIT(R1,R2,K0,SEED)
PRINT *,''
OPEN(UNIT=20,FILE='out.dat',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=21,FILE='seqr.dat',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=24,FILE='seqp.dat',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=18,FILE='force.dat',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=19,FILE='error.dat',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=26,FILE='moments.dat',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=25,FILE='gaussianize.dat',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=27,FILE='phase.dat',STATUS='UNKNOWN')
TIME=0.0D+0
PRINT *,'Computing the initial energy...'
CALL OUTP(20,ENO,TIME)
PRINT *,'Initial energy: ',ENO/N
PRINT *,''
PRINT *,''
TC=0.0D+0
TCS=0.0D+0
TCSAVE=0.0D+0
KSAVE=1000
ROLD=R(SEQ)
CALL FORCE()
OPEN(UNIT=22,FILE='phase1.dat',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=23,FILE='phase2.dat',STATUS='UNKNOWN')
C
C BEGINING OF THE TEMPORAL LOOP
C
IF (INTEG.NE.1) GOTO 150
```

C OMELYN ET AL INTEGRATOR:

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

C YOSHIDA INTEGRATOR

```
150  DO 250 I=1,2*N
      P(I)=P(I)+BO*DT*F(I)
```

```

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

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

```

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

```
        IF (INTEG.EQ.1) GOTO 100
        GOTO 150
    ENDIF
    DO 1200 I=1,N
        WRITE(27,2000) R(I),R(I+N),P(I),P(I+N)
1200    CONTINUE
2000    FORMAT(4F30.16)
        CLOSE(18)
        CLOSE(19)
        CLOSE(20)
        CLOSE(21)
        CLOSE(22)
        CLOSE(25)
        CLOSE(26)
        CLOSE(27)
    END
```

## **A.2 Monte Carlo para ensemble microcanônico no equilíbrio para o modelo do Anel.**

Reproduzimos a seguir o algoritmo em Fortran utilizado para análise do ensemble microcanônico de equilíbrio especificamente para o modelo do Anel, para o qual se usa [67]. Os trechos precedidos por C são nossos comentários acerca dos passos do programa:

```
IMPLICIT NONE
    INCLUDE 'dimmax.inc'
    INTEGER I,K,N, IDUM, SEED, KAC, TOTSTEP, AVGSTEP, MODCOUNT, MODMAX, FL
```

```
INTEGER NSTEP , STEPCOUNT

DOUBLE PRECISION E , EPOT , C , TPI , THETA ( NMAX ) , STH ( NMAX ) , CTH ( NMAX ) ,
.     NEWEPOT , PNEW , POLD , PTRANS , RN , PAIRPOT , EPS , ALPHA , RAN4 ,
.     NEWTHETA , DELTA , PP ( NMAX , NMAX ) , PP2 ( NMAX ) , PAVG , OLDS , OLDC , PR ,
.     AVGMAG , AVGMX , AVGMY , PPI , KURT , SIG , KURTAVG , SIGAVG , DLT ,
.     D1 , D2

COMMON STH , CTH , THETA , C , EPS , ALPHA , N

COMMON /POT/ PP

EXTERNAL PAIRPOT , RAN4

C Computes pi and 2*pi
PPI = DACOS ( -1.0D0 )
TPI = 2.0D0 * PPI

C Reads some parameters used in the simulation.
OPEN ( UNIT = 12 , FILE = 'mc.in' , STATUS = 'OLD' )

C Number of particles
READ ( 12 , * ) N

C Total Energy per particle
READ ( 12 , * ) E

C Softening Parameter
READ ( 12 , * ) EPS

C Stregth of the potential
READ ( 12 , * ) C

C Potential exponent: 1/(r+eps)^alpha
READ ( 12 , * ) ALPHA

C Seed for the (pseudo) random number generator
READ ( 12 , * ) SEED

C Total number of Monte-Carlo steps
READ ( 12 , * ) NSTEP
```

*C Kac prescription*

```
READ(12,*) KAC
```

*C Maximal absolute value of coordinate move*

```
READ(12,*) D1
```

```
READ(12,*) D2
```

*C Number of step used at the end to average the potential energy*

```
READ(12,*) AVGSTEP
```

*C Number of complete iterations between two modularizations of angles*

```
READ(12,*) MODMAX
```

*C*

```
CLOSE(12)
```

```
PRINT 50,N,E,EPS,C,ALPHA,SEED,NSTEP,KAC,DELTA
```

```
50 FORMAT(I8,F9.2,F16.8,2F9.2,I10,I16,I3,F8.4)
```

```
E=E*N
```

```
IF (KAC.EQ.1) THEN
```

```
    C=C/N
```

```
ENDIF
```

*C Reads the initial configuration and computes the array with the Sine and*

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

```
DO 100 I=1,N
```

```
    READ(14,*) THETA(I)
```

```
    STH(I)=DSIN(THETA(I))
```

```
    CTH(I)=DCOS(THETA(I))
```

```
100 CONTINUE
```

```
C110 FORMAT(F34.30)
```

*C Computes the initial potential energy*

```
CALL POTENTIAL(N,EPOT)
```

```
PRINT *, 'Initial potential energy: ', EPOT/N
```

```
      IF (EPOT.GT.E) THEN
          PRINT *, 'Energy incompatible with initial condition.'
          STOP
      ENDIF

      C Initializes the random number generator
          IDUM=-SEED
          PR=RAN4(IDUM)

      C Opens file for output of energy values at each round.
          OPEN(UNIT=17,FILE='out.dat',STATUS='UNKNOWN')

      C
      C -----
      C
      C Main LOOP
      C
          DELTA=D1
          OPEN(UNIT=15,FILE='out2.dat',STATUS='UNKNOWN')
          OPEN(UNIT=16,FILE='final.dat',STATUS='UNKNOWN')
          STEPCOUNT=1
          TOTSTEP=0
          PAVG=0.0D+0
          AVGMAG=0.0D+0
          KURTAVG=0.0D+0
          SIGAVG=0.0D+0
          MODCOUNT=0
          DLT=DELTA
          FL=1

      C Each particle is moved randomly a maximum distance delta.
      1000      DO 1500 K=1,N
```

*C Compute the new random angle for that particle*

NEWTETHA=THETA(K)+(RAN4(IDUM)-0.5)\*2.0\*DELTA

*C Supress from the optential energy the pair interaction potential involvi*

NEWEPOT=EPOT

DO 1200 I=1,N

IF (I.NE.K) THEN

IF (I.LT.K) THEN

NEWEPOT=NEWEPOT-PP(I,K)

ELSE

NEWEPOT=NEWEPOT-PP(K,I)

ENDIF

ENDIF

1200 CONTINUE

*C Computes the new Sine and Cossine but keep the old one's*

OLDS=STH(K)

OLDC=CTH(K)

STH(K)=DSIN(NEWTETHA)

CTH(K)=DCOS(NEWTETHA)

*C With these computes the new potential energy adding the pair interaction*

*C potential for the new value of the angle of the K-th particle*

DO 1300 I=1,N

IF (I.NE.K) THEN

PP2(I)=PAIRPOT(I,K)

NEWEPOT=NEWEPOT+PP2(I)

ENDIF

1300 CONTINUE

*C Computes the old and new probability density (the exponent N/2 is taken*

POLD=E-EPOT

```
      IF (NEWEPOT.LT.E) THEN
          PNEW=E-NEWEPOT
      ELSE
          PNEW=0.0D0
      ENDIF

      C Computes the ratio PNEW/POLD and the the move probability. If >= than on
      C Otherwise keeps it with probability PTRANS.
          PTRANS=DSQRT(PNEW/POLD)**N
          IF (PTRANS.GE.1.0D0) GOTO 1100
          RN=RAN4(IDUM)

      C If not reverse the values of STH and CTH and go to the next particle
          IF (RN.GT.PTRANS) THEN
              STH(K)=OLDS
              CTH(K)=OLDC
              GOTO 1500
          ENDIF

      C
1100      TOTSTEP=TOTSTEP+1
          THETA(K)=NEWTHETA
          EPOT=NEWEPOT

      C Update the pair interaction potentials
          DO 1400 I=1,N
              IF (I.NE.K) THEN
                  IF (I.LT.K) THEN
                      PP(I,K)=PP2(I)
                  ELSE
                      PP(K,I)=PP2(I)
                  ENDIF
              ENDIF
```

```

                ENDIF
1400          CONTINUE
C Closes the particle loop
1500  CONTINUE
        IF (FL.EQ.1) THEN
            DELTA=PPI*0.1D+0
            FL=0
        ELSE
            DELTA=DLT
            FL=1
        ENDIF
        STEPCOUNT=STEPCOUNT+1
        MODCOUNT=MODCOUNT+1
        IF (STEPCOUNT.GT.(NSTEP-AVGSTEP)) THEN
            PAVG=PAVG+EPOT
            AVGMX=0.0
            AVGMY=0.0
            DO 1600 K=1,N
                AVGMX=AVGMX+CTH(K)
                AVGMY=AVGMY+STH(K)
            ENDDO
1600  CONTINUE
            AVGMX=AVGMX/N
            AVGMY=AVGMY/N
            AVGMAG=AVGMAG+SQRT(AVGMX**2+AVGMY**2)
C Writes the final configuration to file
C Obtains all final angles in the (0,2*Pi] interval
            CALL MODTHETA(THETA,STH,CTH,SIG,N)
            SIGAVG=SIGAVG+SIG
```

```
      KURT=0.0D+0
      DO 2300 K=1,N
          KURT=KURT+(THETA(K))**4
          WRITE(16,*) THETA(K)
2300    CONTINUE
          KURT=KURT/(N*SIG**4)
          WRITE(15,*) STEPCOUNT,KURT
          KURTAVG=KURTAVG+KURT
      ELSE
          IF (MODCOUNT.GE.MODMAX) THEN
              CALL MODTHETA(THETA,STH,CTH,SIG,N)
              MODCOUNT=0
          ENDIF
      ENDIF
      WRITE(17,*) STEPCOUNT,EPOT/N
C      PRINT *, 'NSTEP=',NSTEP,STEPCOUNT
      IF (DELTA.EQ.D1) THEN
          DELTA=D2
      ELSE
          DELTA=D1
      ENDIF
      IF (STEPCOUNT.LT.NSTEP) GOTO 1000
C
      PAVG=PAVG/AVGSTEP
      AVGMAG=AVGMAG/AVGSTEP
      KURTAVG=KURTAVG/AVGSTEP
      SIGAVG=SIGAVG/AVGSTEP
      CLOSE(16)
```

*C Writes to file the total energy, kinetic energy and potential energy*

```

OPEN(UNIT=18,FILE='energies.dat',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=20,FILE='magnet.dat',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=22,FILE='kurtosis.dat',STATUS='UNKNOWN')
WRITE(18,*) E/N,2.0D+0*(E-PAVG)/N,PAVG/N
WRITE(20,*) E/N,AVGMAG
WRITE(22,*) E/N,KURTAVG,SIGAVG
CLOSE(18)
CLOSE(17)
CLOSE(20)
CLOSE(22)
CLOSE(15)

```

*C Final terminal output*

```

PRINT *,'Final energies per particle:'
PRINT *,'E/N,(E-EPOT)/N,EPOT/N,Pavg'
PRINT *,E/N,(E-EPOT)/N,EPOT/N,PAVG/N
PRINT *,'Magnetization= ',AVGMAG
PRINT *,'Total number of steps= ',TOTSTEP,REAL(TOTSTEP)/(NSTEP*N)
PRINT *,"Kurtosis, sigma= ",KURTAVG,SIGAVG
END

```

### A.3 Monte Carlo para ensemble canônico no equilíbrio para o modelo do Anel.

Reproduzimos a seguir o algoritmo utilizado para análise do ensemble canônico de equilíbrio especificamente para o modelo do Anel, para o qual se usa [67]. Para o ensemble canônico usa-se a variável temperatura, enquanto no microcanônico a abordagem é direta sobre a energia.

**IMPLICIT NONE**

```

    INCLUDE 'dimmax.inc'
    INTEGER I,K,N, IDUM, SEED, KAC, TOTSTEP, AVGSTEP, MODCOUNT, MODMAX, FL
    INTEGER NSTEP, STEPCOUNT
    DOUBLE PRECISION TEMP, EPOT, C, TPI, THETA(NMAX), STH(NMAX), CTH(NMAX),
.     NEWEPOT, PTRANS, RN, PAIRPOT, EPS, ALPHA, RAN4,
.     NEWTHETA, DELTA, PP(NMAX, NMAX), PP2(NMAX), PAVG, OLDS, OLDC, PR,
.     AVGMAG, AVGMX, AVGMY, PPI, KURT, SIG, KURTAVG, SIGAVG, DLT,
.     D1, D2, BETA, EOLD, ENEW, ENERGY
    COMMON STH, CTH, THETA, C, EPS, ALPHA, N
    COMMON /POT/ PP
    EXTERNAL PAIRPOT, RAN4
C Computes pi and 2*pi
    PPI=DACOS(-1.0D0)
    TPI=2.0D0*PPI
C Reads some parameters used in the simulation.
    OPEN(UNIT=12, FILE='mc.in', STATUS='OLD')
C Number of particles
    READ(12,*) N
C Temperature
    READ(12,*) TEMP
C Softening Parameter
    READ(12,*) EPS
C Stregth of the potential
    READ(12,*) C
C Potential exponent: 1/(r+eps)^alpha
    READ(12,*) ALPHA

```

*C Seed for the (pseudo) random number generator*

```
READ(12,*) SEED
```

*C Total number of Monte-Carlo steps*

```
READ(12,*) NSTEP
```

*C Kac prescription*

```
READ(12,*) KAC
```

*C Maximal absolute value of coordinate move*

```
READ(12,*) D1
```

```
READ(12,*) D2
```

*C Number of step used at the end to average the potential energy*

```
READ(12,*) AVGSTEP
```

*C Number of complete iterations between two modularizations of angles*

```
READ(12,*) MODMAX
```

*C*

```
CLOSE(12)
```

```
BETA=1.0/TEMP
```

```
PRINT 50,N,TEMP, EPS,C, ALPHA, SEED, NSTEP, KAC, DELTA
```

```
50 FORMAT(I8,F9.2,F16.8,2F9.2,I10,I16,I3,F8.4)
```

```
IF (KAC.EQ.1) THEN
```

```
    C=C/N
```

```
ENDIF
```

*C Reads the initial configuration and computes the array with the Sine and*

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

```
DO 100 I=1,N
```

```
    READ(14,*) THETA(I)
```

```
    STH(I)=DSIN(THETA(I))
```

```
    CTH(I)=DCOS(THETA(I))
```

```
100 CONTINUE
```

```
C110   FORMAT(F34.30)
C Computes the initial potential energy
      CALL POTENTIAL(N,EPOT)
      ENERGY=0.5*TEMP*N
C Initializes the random number generator
      IDUM=-SEED
      PR=RAN4(IDUM)
C Opens file for output of potential energy values at each round.
      OPEN(UNIT=17,FILE='out.dat',STATUS='UNKNOWN')
C
C -----
C
C Main LOOP
C
      DELTA=D1
      OPEN(UNIT=15,FILE='out2.dat',STATUS='UNKNOWN')
      OPEN(UNIT=16,FILE='final.dat',STATUS='UNKNOWN')
      STEPCOUNT=1
      TOTSTEP=0
      PAVG=0.0D+0
      AVGMAG=0.0D+0
      KURTAVG=0.0D+0
      SIGAVG=0.0D+0
      MODCOUNT=0
      DLT=DELTA
      FL=1
C Each particle is moved randomly a maximum distance delta.
1000   DO 1500 K=1,N
```

*C Compute the new random angle for that particle*

```
NEWTHETA=THETA(K)+(RAN4(IDUM)-0.5)*2.0*DELTA
```

*C Supress from the optential energy the pair interaction potential involvi*

```
NEWEPOT=EPOT
```

```
DO 1200 I=1,N
```

```
  IF (I.NE.K) THEN
```

```
    IF (I.LT.K) THEN
```

```
      NEWEPOT=NEWEPOT-PP(I,K)
```

```
    ELSE
```

```
      NEWEPOT=NEWEPOT-PP(K,I)
```

```
    ENDIF
```

```
  ENDIF
```

```
1200      CONTINUE
```

*C Computes the new Sine and Cossine but keep the old one's*

```
OLDS=STH(K)
```

```
OLDC=CTH(K)
```

```
STH(K)=DSIN(NEWTHETA)
```

```
CTH(K)=DCOS(NEWTHETA)
```

*C With these computes the new potential energy adding the pair interaction*

*C potential for the new value of the angle of the K-th particle*

```
DO 1300 I=1,N
```

```
  IF (I.NE.K) THEN
```

```
    PP2(I)=PAIRPOT(I,K)
```

```
    NEWEPOT=NEWEPOT+PP2(I)
```

```
  ENDIF
```

```
1300      CONTINUE
```

*C Computes the total energy*

```
EOLD=0.5*TEMP*N+EPOT
```

```
      ENEW=0.5*TEMP*N+NEWEPOT
      PTRANS=DEXP(BETA*(EOLD-ENEW))
      IF (PTRANS.GE.1.0D0) GOTO 1100
      RN=RAN4(IDUM)
      C If not reverse the values of STH and CTH and go to the next particle
      IF (RN.GT.PTRANS) THEN
          STH(K)=OLDS
          CTH(K)=OLDC
          GOTO 1500
      ENDIF
      C
1100      TOTSTEP=TOTSTEP+1
          THETA(K)=NEWTHETA
          EPOT=NEWEPOT
          ENERGY=0.5*TEMP*N+EPOT
      C Update the pair interaction potentials
          DO 1400 I=1,N
              IF (I.NE.K) THEN
                  IF (I.LT.K) THEN
                      PP(I,K)=PP2(I)
                  ELSE
                      PP(K,I)=PP2(I)
                  ENDIF
              ENDIF
          ENDIF
1400      CONTINUE
      C Closes the particle loop
1500      CONTINUE
          IF (FL.EQ.1) THEN
```

```

        DELTA=PPI*0.1D+0
        FL=0
ELSE
        DELTA=DLT
        FL=1
ENDIF
        STEPCOUNT=STEPCOUNT+1
        MODCOUNT=MODCOUNT+1
IF ( STEPCOUNT.GT.(NSTEP-AVGSTEP)) THEN
        PAVG=PAVG+EPOT
        AVGMX=0.0
        AVGMY=0.0
        DO 1600 K=1,N
                AVGMX=AVGMX+CTH(K)
                AVGMY=AVGMY+STH(K)
1600    CONTINUE
        AVGMX=AVGMX/N
        AVGMY=AVGMY/N
        AVGMAG=AVGMAG+SQRT(AVGMX**2+AVGMY**2)
C Writes the final configuration to file
C Obtains all final angles in the (0,2*Pi] interval
        CALL MODTHETA(THETA,STH,CTH,SIG,N)
        SIGAVG=SIGAVG+SIG
        KURT=0.0D+0
        DO 2300 K=1,N
                KURT=KURT+(THETA(K))**4
                WRITE(16,*) THETA(K)
2300    CONTINUE

```

```

        KURT=KURT/(N*SIG**4)
        WRITE(15,*) STEPCOUNT,KURT
        KURTAVG=KURTAVG+KURT
    ELSE
        IF (MODCOUNT.GE.MODMAX) THEN
            CALL MODTHETA(THETA,STH,CTH,SIG,N)
            MODCOUNT=0
        ENDIF
    ENDIF
    WRITE(17,*) STEPCOUNT,EPOT/N
C     PRINT *,'NSTEP=',NSTEP,STEPCOUNT
    IF (DELTA.EQ.D1) THEN
        DELTA=D2
    ELSE
        DELTA=D1
    ENDIF
    IF (STEPCOUNT.LT.NSTEP) GOTO 1000
C
    PAVG=PAVG/AVGSTEP
    AVGMAG=AVGMAG/AVGSTEP
    KURTAVG=KURTAVG/AVGSTEP
    SIGAVG=SIGAVG/AVGSTEP
    CLOSE(16)
C Writes to file the total energy,kinetic energy and potential energy
    OPEN(UNIT=18,FILE='energies.dat',STATUS='UNKNOWN')
    OPEN(UNIT=20,FILE='magnet.dat',STATUS='UNKNOWN')
    OPEN(UNIT=22,FILE='kurtosis.dat',STATUS='UNKNOWN')
    WRITE(18,*) ENERGY/N,0.5*TEMP,PAVG/N

```

```
WRITE(20,*) ENERGY/N,AVGMAG
WRITE(22,*) ENERGY/N,KURTAVG,SIGAVG
CLOSE(18)
CLOSE(17)
CLOSE(20)
CLOSE(22)
CLOSE(15)
```

*C Final terminal output*

```
PRINT *,'Final energies per particle:'
PRINT *,'E/N,(E-EPOT)/N,EPOT/N,Pavg'
PRINT *,ENERGY/N,TEMP/2.0,EPOT/N,PAVG/N
PRINT *,'Magnetization= ',AVGMAG
PRINT *,'Total number of steps= ',TOTSTEP,REAL(TOTSTEP)/(NSTEP*N)
PRINT *,"Kurtosis, sigma= ",KURTAVG,SIGAVG
END
```

## Referências

- [1] A. Campa, T. Dauxois, e S. Ruffo. Statistical mechanics and dynamics of solvable models with long-range interactions. *Phy. Rep.*, 480:57, 2009.
- [2] T. Dauxois, S. Ruffo, E. Arimondo, e M. Wilkens. *Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long Range Interactions: An Introduction*. Springer, 2002.
- [3] T. Teles, Y. Levin, R. Pakter, e F.B. Rizzato. Statistical mechanics of unbound two-dimensional self-gravitating systems. *J. Stat. Mech.* P05007, 2010.
- [4] Y. Levin, R. Pakter, e T. Teles. Collisionless relaxation in non-neutral plasmas. *Physical Review Letters*, 100, 040604, 2008.
- [5] A. Antoniazzi, D. Fanelli, e S. Ruffo. Hamiltonian mean field model: anomalous or normal diffusion? *AIP Conf. Proc.* 965, 122, 2007.
- [6] C. Mouhot e C. Villani. On Landau damping. *Acta Math*, 207, 29-201, 2011.
- [7] D. Lynden Bell. Statistical mechanics of violent relaxation in stellar systems. *Mon. Not. R. Astr. Soc.*, 36:101, 1967.
- [8] T. K. Nakamura. Statistical mechanics of a collisionless system based on de maximum entropy principle. *The Astrophysical Journal*, 531: 739-743, 2000.
- [9] F.H. Shu. On the statistical mechanics of violent relaxation. *Astro. Phys. Journal*, 225:83, 1978.
- [10] M. Stiavelli e G. Bertin. Statistical mechanics and equilibrium sequences of ellipticals. *Mon. Not. R. Astr.*, 229:61, 1987.
- [11] A. Kull, R.A. Tremann, e H. Böhringer. A note on the statistical mechanics of violent relaxation of phase space elements of different densities. *Astro. Phys. Journal*, 484:58, 1997.
- [12] G. Bertin e M. Trenti. Thermodynamical description of a family of partially relaxed stellar systems. *Astro. Phys. Journal*, 584:729, 2003.
- [13] G. Gallavotti. Ergodicity: a historical perspective. equilibrium and nonequilibrium. *Arxiv: 1604.04239v1 [cond-mat.stat-mech]*, 2016.

- [14] M. Badino. The foundational role of ergodicity theory. *Found. of Sc.*, 11:323, 2006.
- [15] D. Szasz. *Boltzmann's ergodic hypothesis, a conjecture for centuries?* Springer, 1994.
- [16] F. Feil, S. Naumov, J. Michaelis, R. Valliulin, D. Enke, J. Kärger, e C. Bräuchle. Single-particle and ensemble diffusivities—test of ergodicity. *Angewandte Chemie International Edition*, 50, 1-5, 2011.
- [17] H. Yoshida. Construction of higher order symplectic integrators. *Physics Letters A*, 150, 5, 1990.
- [18] M. Antoni e S. Ruffo. Clustering and relaxation in hamiltonian long-range dynamics. *Phys. Rev. E* 52(3):2361-2374, 1995.
- [19] A. Figueiredo, T. M. Rocha Filho, M. A. Amato, Z. T. Oliveira Jr, e R. Matsushita. Truncated lévy flights and weak ergodicity breaking in the hamiltonian mean field model. *Phys. Rev. E*, 89(022106), 2014.
- [20] W. Braun e K. Hepp. The vlasov dynamics and its fluctuations in the  $1/n$  limit of interacting classical particles. *Commun. math. Phys.* 56, 125, 1977.
- [21] S.W. Hawking. Black hole explosions? *Nature*, 248:30, 1974.
- [22] J.C Maxwell. *On Boltzmann's Theorem on the average distribution of energy in a system with material points.* Cambridge Philosophical Society's Trans., London, 1876.
- [23] W.E. Thirring. Systems with negative specif heat. *Z.f. Phys.*, 235:339, 1970.
- [24] D. Lynden-Bell e R. M. Lynden-Bell. On the negative specific heat paradox. *Mon. Not. R. Astr.*, 181(405), 1977.
- [25] J. Binney e S. Tremaine. *Galactic Dynamics.* Princeton University Press, USA, 1987.
- [26] H.B. Callen. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics.* John Willey Sons, USA, 1985.
- [27] M. D'Agostino, F. Gulminelli, Ph. Chomaz, M. Bruno, F. Cannata, R. Bougault, N. Colonna, F. Gramegna, I. Iori, N. Le Neindre, G. V. Margagliotti, P. F. Mastinu, P. M. Milazzo, A. Moroni, e G. Vannini. Negative heat capacity in the critical region of nuclear fragmentation: an experimental evidence of the liquid-gas phase transition. *Phys. Let. B*, 473:219, 2000.
- [28] J. Barré, D. Mukamell, e S. Ruffo. Inequivalence of ensembles in a system with long range interactions. *Phys. Rev. Let.*, 87(030601), 2001.

- 
- [29] J. W. Gibbs. *Elementary Principles in Statistical Mechanics with Especial Reference to the Rational Foundation of Thermodynamics*. Yale University Press, 1902.
- [30] H. Touchette. Ensemble equivalence for general many body systems. *EPL*, 96(5), 2011.
- [31] H. Touchette, R. S. Ellis, e B. Turkington. An introduction to the thermodynamic and macrostate levels of nonequivalent ensembles. *Phys. A*, 340:138, 2004.
- [32] J. R. Steiner. *Contribuições à Mecânica Estatística de sistemas com interação de longo alcance*. PhD thesis, Universidade de Brasília, 2014.
- [33] P.H. Chavanis. Kinetic equations for systems with long-range interactions: a unified description. *J. Stat. Mech.*, (05019), 2010.
- [34] I. Arad e D. Lynden Bell. Inconsistency in relaxation theories. *Mon. Not. R. Astr.*, 361:385, 2005.
- [35] J. R. S. Moura, T. M. Rocha Filho, M. A. Amato, A. E. Santana, e A. Figueiredo. Dynamics and physical interpretation of quasi-stationary states in systems with long-range interactions. *Phys. Rev. E*, 89(032116), 2014.
- [36] S. T. Thornton e J. B. Marion. *Classical Dynamics of particles and systems*. Thomson Books/Cole, USA, 2004.
- [37] T. N. Teles. *Mecânica Estatística em Sistemas com Interações de Longo Alcance: Estados Estacionários e Equilíbrio*. PhD thesis, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2012.
- [38] T.M. Rocha Filho. *Mecânica Clássica*. Brasil, 2009.
- [39] P. Ehrenfest e T. Ehrenfest. *The Conceptual Foundations of the Statistical Approach in Mechanics*. Dover phoenix editions, USA, 1959.
- [40] S. Brush. Proof of the impossibility of ergodic systems: the 1913 papers of rosenthal an plancherel. *Transport theory Statist. Phys.*, 4, 287-298, 1971.
- [41] G. D. Birkhoff. Proof of the ergodic theorem. *PNAS*, 17, 656, 1931.
- [42] R. Balescu. *Statistical Dynamics - Matter out of Equilibrium*. Imperial College Press, 1997.
- [43] V. I. Arnold e A. Avez. *Ergodic Problem of Classical Mechanics*. Addison-Wesley, USA, 1968.
- [44] A. Figueiredo, T. M. Rocha Filho, e M. A. Amato. Ergodicity and central limit theorem in systems with long rang interactions. *EPL* 83, 30011, 2008.

- [45] A. Rebenshtok e E. Barkai. Weakly non-ergodic statistical physics. *J. Stat. Phys.* *s10955-008-9610-3*, 2008.
- [46] R. Klages, G. Radons, e I. M. Sokolov. *Anomalous Transport Foundations and Applications*. Wiley-VCH, Weinheim, 2008.
- [47] A. Janicki e A. Weron. *Simulation and Chaotic Behaviour of  $\alpha$ -Stable Stochastic Processes*. Marcel Dekker, USA, 1994.
- [48] S. Cambanis, K. Podgorski, e A. Weron. Chaotic behaviour of infinitely divisible processes. *StudiaMath.* *115*, 109, 1995.
- [49] M. Magdziarz e A. Weron. Anomalous diffusion: Testing ergodicity breaking in experimental data. *Phys. Rev. E* *84*, 051138, 2011.
- [50] B. N. Miller e J. L. Rouet. Ewald sums for one dimension. *Phys. Rev. E* *82*, 066203, 2010.
- [51] L. Casetti e C. Nardini. A solvable model of a self-gravitating system. *J. Stat. Mech.* *P05006*, 2010.
- [52] T. Tatekawa, F. Bouchet, T. Dauxois, e S. Ruffo. Thermodynamics of the self-gravitating ring model. *Phys. Rev. E* *71*, 05611, 2005.
- [53] D. P. Landau e K. Binder. *A Guide to Monte Carlo simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, USA, 2009.
- [54] W. Krauth. *Statistical Mechanics Algorithms and Computation*. Oxford University Press, USA, 2006.
- [55] S. J. Aarseth, C. A. Tout, e R. A. Mardling. *The Cambridge N-Body Lectures*. Springer, Berlin Heidelberg, 2008.
- [56] E. Forest. Canonical integrators as tracking codes. *SSC* *138*, 1987.
- [57] F. Neri. Lie algebras e canonical integration. *Departament of physics, University of Maryland*, 1988.
- [58] M.F.P. Silva Júnior. Comparação de métodos computacionais para o estudo da termodinâmica de sistemas com interações de longo alcance. Dissertação de Mestrado. Universidade de Brasília, 2015.
- [59] C. H. C. Silvestre e T.M. Rocha Filho. Ergodicity in a two-dimensional self-gravitating many-body system. *Physics Letters A* *380*, 337-348, 2016.
- [60] T. M. Rocha Filho, M. A. Amato, A. E. Santana, A. Figueiredo, e J. R. S. Moura. Scaling of the dynamics of homogeneous states of one-dimensional long-range interacting systems. *Phys. Rev. E* *90*, 032133, 2014.
- [61] C. H. C. Silvestre. Ergodicidade em sistemas autogravitantes em duas e três dimensões. Dissertação de Mestrado. Universidade de Brasília, 2012.

- 
- [62] T. N. Teles, Y. Levin., e R. Pakter. Nonequilibrium statistical mechanics of systems with long-range interactions. *Phys. Rep.* 535, 1, 2014.
- [63] S. Chandrasekhar e J. von Neumann. The statistics of the gravitational field arising from a random distribution of stars. i. the speed of fluctuations. *Astrophys. J.* 95, 489, 1942.
- [64] S. Chandrasekhar e J. von Neumann. *Stochastic Problems in Physics and Astronomy*. 1943.
- [65] H.E. Kandrup. Stochastic gravitational fluctuations in a self-consistent mean field theory. *Phys. Rep.* 63, 1, 1980.
- [66] P.H. Chavanis. Stochastic gravitational fluctuations in a self-consistent mean field theory. *Eur. Phys. J. B* 70, 413, 2009.
- [67] J.R. Ray. Microcanonical ensemble monte carlo method. *MPhys. Rev. A* 44, 4061, 1991.