

Universidade Estadual de Campinas
Instituto de Física 'Gleb Wataghin'

Tese de Doutorado

A dinâmica caótica como
mecanismo de dissipação – o
papel das órbitas periódicas

Este exemplar corresponde à
versão final da tese de Doutorado
defendida pelo Sr. Túlio Oliveira
de Carvalho e aprovada pela banca
examinadora.

18/4/96

Aluno: Túlio Oliveira de Carvalho ✓

Orientador: Prof. Dr. Marcus Aloízio Martinez de Aguiar

11 de Abril de 1996

Autor: Túlio Oliveira de Carvalho

A dinâmica caótica como
mecanismo de dissipação – o
papel das órbitas periódicas

Física Geral, Teoria

Orientador: Prof. Dr. Marcus Aloízio Martinez de Aguiar

Tese apresentada no Instituto de Física
'Gleb Wataghin', na Universidade Estadual
de Campinas, como parte dos requisitos para
obtenção do título de Doutor em Ciências.

11 de Abril de 1996

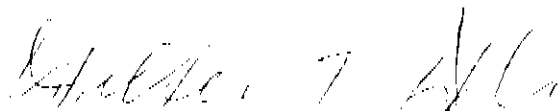
PARECER DE APROVAÇÃO
DEFESA DE TESE DE DOUTORADO DE
TÚLIO OLIVEIRA DE CARVALHO

DATA: 11 / 04 / 96

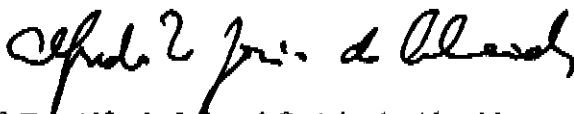
BANCA EXAMINADORA:



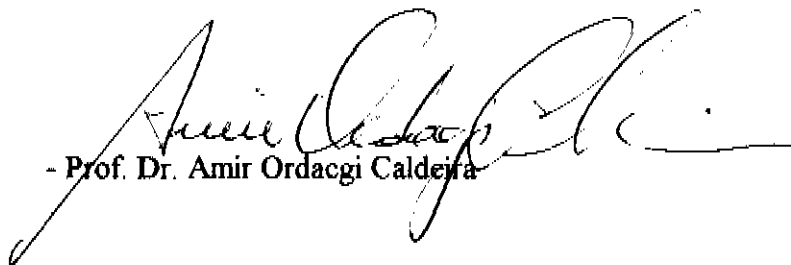
- Prof. Dr. Marcus Aloizio Martinez de Aguiar (Orientador)



- Prof. Dr. Walter Felipe Wreszinski



- Prof. Dr. Alfredo Miguel Ozório de Almeida



- Prof. Dr. Amir Ordacgi Caldeira



- Prof. Dr. César Rogério de Oliveira

Dedico esta tese à Ana.

Esta tese foi financiada pela Fapesp, a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo.

Agradeço aos colegas, Sandra Prado e Francisco Bajay, pelas boas discussões do tema.

Ao Ivan. À Eliana. Ao Delano. Ao Marcos Gomes. Ao Marcelo.

Ao Gian, que peregrina na França e não viu. À Tida, boa irmã. À Ana. Aos meus pais. À minha família. Aos meus sogros.

A todos aqueles que injustamente esqueço.

Aos professores Francesco Mercuri, Orlando Lopes e Milton Lopes.

Aos professores Alfredo Ozorio de Almeida, Kyoko Furuya, Amir Caldeira e Jonathan Robbins.

E ao Marcus Aguiar, professor e orientador e amigo. Ajudou muito.

e começo aqui e meço aqui este começo e recomeço e remeço e arremesso e aqui me meço quando se vive sob a espécie da viagem o que importa não é a viagem mas o começo da por isso meço por isso começo escrever mil páginas escrever milumapáginas para acabar com a escritura para começar com a escritura para acabarcomeçar com a escritura por isso recomeço por isso arremeço por isso teço escrever sobre escrever é o futuro do escrever sobrescrevo sobrescravo em milumanoites milumapáginas ou uma página em uma noite que é o mesmo noites e páginas mesmam ensimesmam onde o fim é o começo onde escrever sobre o escrever é não escrever sobre não escrever e por isso começo descomeço pelo ...

Haroldo de Campos

Conteúdo

Introdução	1
1 Duas concepções preliminares	7
1.1 O modelo de Caldeira e Leggett em Mecânica Clássica	7
1.2 O modelo do reservatório caótico	11
2 Caos clássico como um ambiente para a dissipação	19
2.1 O modelo com o potencial NELSON	21
2.2 Teoria: o reservatório caótico como um banho de osciladores	30
2.2.1 O termo de memória e dissipação	34
2.3 Aplicando ao potencial NELSON	38
2.4 A aproximação Markoffiana	46
2.5 Estudo da equação dissipativa – reservatórios de bilhares	49
2.5.1 Resultados numéricos	53
2.6 Conclusões parciais	61
3 Formulação Heurística dos espaços de Hilbert	65
3.1 O operador de Liouville	65
3.2 O problema unidimensional geral	68
3.2.1 O oscilador harmônico e outros exemplos	71
3.3 Sistemas com mais de um grau de liberdade	74
3.3.1 Não integrabilidade e órbitas periódicas	78
3.4 O princípio da uniformidade	81

3.5	Obtenção da medida	85
3.5.1	O caso integrável	87
3.5.2	O caso caótico	89
3.5.3	Discussão	91
3.6	O produto interno – aplicações	94
3.6.1	Acerca dos pesos das órbitas periódicas	97
4	Espaços de Hilbert em Mecânica Clássica	100
4.1	Definições e conceitos preliminares	102
4.2	Consequências da medida de Dirac	106
4.3	Propriedades do espectro caótico	112
5	Conclusões	114
A	O integrador simplético	117
B	Proliferação de órbitas	121
C	Questões diversas	124

Resumo

Estudamos classicamente um sistema com três graus de liberdade constituído de dois subsistemas fracamente acoplados. O primeiro, um sistema caótico com dois graus, funciona como um reservatório para o segundo, o sistema de interesse. Os efeitos da dinâmica caótica sobre o sistema de interesse torna o movimento deste semelhante ao movimento Browniano, que é dissipativo.

A resposta linear do reservatório, componente destes efeitos, está na sua densidade espectral. Uma investigação analítica do reservatório caótico *per se* evidencia que a densidade espectral pode ser escrita em termos de uma soma de funções delta nas frequências das órbitas periódicas, com pesos distintos.

Abstract

We study classically a system with three degrees of freedom, composed of two subsystems weakly coupled. The first, a chaotic system with two freedoms, works as a reservoir for the second, the system of interest. The effects of the chaotic dynamics on the system of interest renders the motion of the latter similar to the Brownian movement, which is dissipative.

The linear response of the reservoir, a component of those effects, lies on its spectral density. An analytical investigation of the chaotic reservoir alone shows that the spectral density can be written in terms of a sum of Dirac delta functions on the frequencies of the periodic orbits, with distinct weights.

Introdução

Esta tese trata de alguns aspectos da Mecânica Clássica de sistemas com poucos graus de liberdade que apresentam dinâmica caótica.

Para incorporar a dissipação da energia de um certo sistema que estamos interessados no formalismo hamiltoniano independente do tempo, aumentamos o universo deste sistema, acoplando-o a um reservatório.

Particularmente, investigamos como a dinâmica caótica pode ser uma causa da dissipação em sistemas macroscópicos. Este assunto é da maior importância, pois representa mais um passo no sentido de entendermos o mecanismo da irreversibilidade microscopicamente, ainda que venhamos a nos restringir à mecânica clássica.

A possibilidade de um sistema caótico ser um reservatório para o Movimento Browniano de uma partícula a ele acoplada encerra a motivação e o primeiro resultado de destaque. O arranjo para modelamento da dissipação *sistema de interesse + reservatório*, tal como o expomos aqui, é devido a Caldeira e Leggett [1], em que o reservatório é modelado por um conjunto de osciladores harmônicos. A substituição do reservatório de osciladores por um ensemble de sistemas caóticos, com o mesmo resultado dissipativo, foi primeiro aventada por Wilkinson [2] e mais tarde formalizada por Berry e Robbins [3]. Conforme se verá adiante, o modelo do reservatório caótico já estava pronto em linhas gerais desde o trabalho de Ott [4], culminando na formulação de Berry e Robbins.

A formulação de uma teoria de espaços de Hilbert em Mecânica Clássica

constitui o segundo resultado. Esta, por sua vez, permite uma releitura de uma regra de soma de quantidades clássicas, o ‘princípio da uniformidade’, assim chamado por Hannay e Ozorio de Almeida [5]. De fato, uma das relações do princípio da uniformidade é que nos inspirou a medida de Dirac no espaço de fases, que é a base da construção do espaço de Hilbert.

Nesta introdução, expomos as hipóteses do tratamento do Movimento Browniano que aparecem nos trabalhos de Einstein [6]. Procuramos identificar desta maneira as idéias básicas dos modelos para dissipação de Caldeira-Leggett (C-L) e Berry Robbins (B-R). Não é nossa pretensão fazer uma revisão das diversas e numerosas contribuições neste campo.

Em seu trabalho seminal sobre o movimento de pequenas partículas suspensas num líquido de acordo com a termodinâmica clássica [7], Einstein estabeleceu os elementos para um tratamento teórico do Movimento Browniano.

O sistema global sob investigação constitui-se de um líquido a temperatura T e um conjunto de partículas leves o suficiente para se poder desprezar o efeito da gravidade. De fato, o que se observa (e se pretende descrever teoricamente) é o movimento das partículas na superfície do líquido, de modo que a tensão superficial do líquido deve ser grande o suficiente para equilibrar a força da gravidade. O processo de difusão sob discussão se dá na superfície do líquido.

O movimento irregular das partículas no líquido é devido às colisões com as moléculas deste último, cujas amplitudes estão relacionadas com a temperatura do sistema. As grandezas termodinâmicas do sistema, como temperatura, pressão e volume, são determinadas pelo líquido apenas, caracterizando-o como um *reservatório* termodinâmico. Temos aqui a primeira das hipóteses de trabalho: o reservatório como um todo está *fracamente acoplado* às partículas em suspensão. Isto não significa absolutamente que as partículas em suspensão são fracamente perturbadas em seu movimento, porquanto interação com as muitas moléculas do líquido.

Considerando ainda que não há interação entre as diversas partículas em

suspensão, torna-se irrelevante se se está pensando numa grande quantidade de partículas juntas no líquido ou numa grande quantidade de observações experimentais de *uma* partícula no mesmo líquido. Portanto, o problema se resume ao de uma partícula interagindo com um reservatório. Uma sequência $(x(t_i), p(t_i))$, em que (x, p) é um ponto no espaço de fases da partícula é uma instância de observação do seu movimento. O universo assim constituído mantém o caráter estatístico, que reside no reservatório, pois cada instância de observação teria um resultado diferente. Desta forma somos obrigados a introduzir médias para descrever o movimento da partícula.

A última consideração importante é a existência de um intervalo de tempo τ durante o qual a partícula perde a memória de seu movimento anterior. Este tempo τ é pequeno comparado com o tempo de observação, mas suficiente para que “os movimentos executados pela partícula em dois intervalos consecutivos possam ser considerados como fenômenos mutuamente independentes” [7]. A existência deste tempo τ só é garantida se a hipótese ergódica é satisfeita pelo reservatório. Apenas recentemente Sinai provou a existência de um sistema dinâmico com dois graus de liberdade que satisfaz tal hipótese [8]. A discussão deste ponto está fora dos objetivos desta tese, bastando-nos considerar este tempo τ como proporcional ao tempo de correlação do reservatório.

A independência do movimento para instantes de tempo suficientemente separados caracteriza o Movimento Browniano como um processo estocástico dito de Markoff. A formulação inicial, devida a Einstein e Smoluchowski, embute um processo de Markoff no espaço de configuração. Posteriormente, Uhlenbeck e Ornstein expressaram o processo de Markoff no espaço de fases, como forças impulsivas que modificam a velocidade da partícula Browniana descontinuamente. O refinamento do intervalo de tempo de observação é que permite ver esta diferença: para Einstein-Smoluchowski, o gráfico $\dot{x}(t) \times t$ tem descontinuidades enquanto que para Ornstein-Uhlenbeck ele tem bicos.

É importante destacar que a identificação de um tempo τ como descrito acima implica na introdução de uma escala de tempo rápida, em que as

moléculas do líquido experimentam mudanças significativas no seu estado, descrito por todas as coordenadas (X_i, P_i) no seu espaço de fases. Por outro lado, o tempo de observação t é o intervalo em que se vê mudanças significativas no estado da partícula em suspensão. A suposição $\tau \ll t$ é exatamente a hipótese adiabática: o reservatório é um sistema cuja variação microscópica é *rápida* enquanto a partícula de *interesse*, i.e. sobre a qual se faz observações, é *lenta*.

Além do mais, a presença de um processo estocástico no movimento introduz a idéia de probabilidade e valores médios para sua descrição. A partir desta noção, Einstein introduz a probabilidade ϕ de deslocamento (de um certo tanto Δ) para a direita ou para a esquerda de uma partícula Browniana em uma dimensão, e assumindo a paridade de ϕ (isotropia do meio), obtém a equação parabólica

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} , \quad (0.1)$$

em que f é a probabilidade de uma partícula estar na posição x no tempo t . Esta é a equação de difusão e D é chamado o coeficiente de difusão. Supondo que se saiba que a partícula está na origem no instante $t = 0$, tem-se

$$f(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp -\frac{x^2}{4Dt} , \quad (0.2)$$

que resulta na fórmula bastante conhecida para o desvio quadrático médio da posição x

$$x^2 = 2Dt . \quad (0.3)$$

Note que a natureza estocástica do Movimento Browniano introduz as duas possibilidades de descrição do movimento da partícula: como uma densidade de probabilidade (0.2) ou através de valores esperados (0.3).

Para deduzir a relação de Einstein eq.(0.3), podemos também partir da equação de Langevin para os valores esperados da coordenada x de uma *partícula livre*:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -\eta \frac{dx}{dt} + F(t) .$$

Nesta equação, η é a viscosidade do líquido, que Einstein já havia relacionado com a constante D usando a noção de pressão osmótica: $D = kT/\eta$, em que T é a temperatura. $F(t)$ é uma força flutuante cuja média se anula e que satisfaz

$$\langle F(t)F(t') \rangle = 2\eta kT \phi(t - t')$$

em que ϕ é uma função par localizada na origem (veja o artigo de Uhlenbeck e Ornstein em [9]), que bem pode ser a função delta de Dirac. A introdução da função randômica $F(t)$ procura fazer a mínima do caráter estatístico das colisões moleculares, de acordo com a teoria cinética. O tempo de correlação ao qual já nos referimos é exatamente o intervalo de tempo em que ϕ não se anula (o suporte de ϕ).

Novamente, a natureza estocástica da força $F(t)$ faz com que x e $\dot{x}$ sejam variáveis aleatórias. Atribui-se então uma probabilidade de a coordenada x ocorrer no tempo t , obtendo-se uma distribuição de probabilidades

$$\Phi(x_0, x, t)dx ,$$

em que x_0 é a posição da partícula no instante inicial. A partir da função Φ obtém-se todas as médias da variável x , do tipo x^k . Ela é portanto o objeto mais geral que a teoria pode fornecer.

Mesmo relevando o caráter estocástico da equação de evolução de x , tem-se uma vantagem em relação às considerações a partir da teoria molecular, pois podemos encarar-la como uma equação de movimento de x sujeito a uma força externa. Um passo natural é introduzir-se um potencial para a partícula de interesse, obtendo a equação de Langevin geral

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -\eta \frac{dx}{dt} - \frac{\partial V}{\partial x} + F(t) , \quad (0.4)$$

Ainda neste ponto de vista, ao termo do lado direito proporcional à velocidade pode-se associar uma força de atrito.

Difusão e dissipação ficam deste modo atadas. Estaremos motivados a verificar se o acoplamento a um sistema caótico pode modelar a força randômica

$F(t)$ e o termo dissipativo. Antes porém, faremos um breve resumo no primeiro capítulo do modelo do banho de osciladores, devido a Caldeira e Leggett [1], e do reservatório caótico, devido a Ott, Brown, Grebogi, Wilkinson, Berry e Robbins [4, 10, 2, 3] aplicados à dinâmica clássica de uma partícula browniana.

A apresentação da tese é organizada da seguinte maneira. No segundo capítulo, estudamos analítica e numericamente o problema da dissipação modelada pelo acoplamento a um sistema caótico. Um requisito essencial para se chegar aos resultados numéricos, a noção de espaços de Hilbert em Mecânica Clássica, só é exposto no capítulo 4 de uma maneira formal matematicamente. No capítulo 3, expomos de forma heurística a introdução do que é fundamental para a realização proposta para o espaço de Hilbert: a medida de Dirac no espaço de fases. Como já dissemos ela se baseia numa releitura do princípio da uniformidade. Destacamos ainda no capítulo 3 a fórmula para a autocorrelação de variáveis dinâmicas em termos de uma soma sobre órbitas periódicas, que poderá ser testada numericamente. Apresentamos nossas conclusões no capítulo cinco.

Capítulo 1

Duas concepções preliminares

1.1 O modelo de Caldeira e Leggett em Mecânica Clássica

O modelo do banho de osciladores explora em grande medida a idéia de que o reservatório é levemente perturbado pela partícula de interesse. O modelo é melhor justificado considerando-se seu lado quântico. A idéia básica é que o potencial de interação com a partícula Browniana é muito pequeno para promover transições de segunda ordem entre o estado fundamental e os outros níveis de energia do reservatório, que seriam suficientemente espaçados. Já para temperatura finita, a justificativa para o modelo é feita via integração funcional (para mais detalhes, veja apêndice C de [1] e a referência [47] daquele artigo).

No limite clássico, a Lagrangeana do reservatório assume a forma

$$L_R = \sum_k \frac{1}{2} m_k \left\{ \dot{q}_k^2 - \omega_k^2 q_k^2 \right\} , \quad (1.1)$$

em que $\hbar\omega_k$ reproduzem as diferenças entre os níveis de energia do reservatório, pensado inicialmente como um sistema de muitos corpos.

O acoplamento é feito através das coordenadas

$$L_I = - \sum_k C_k q_k q \ , \quad (1.2)$$

mas pode ser também através dos momentos [11]. Finalmente, a Lagrangeana do sistema de interesse é dada por

$$L_S = \frac{1}{2} M \dot{q}^2 - V_0(q) \quad (1.3)$$

As equações de movimento para o universo *reservatório* interagindo com a *partícula* são resolvidas usando a transformada de Laplace. Da Lagrangeana total $L = L_R + L_S + L_I$, obtemos

$$\begin{aligned} M \ddot{q} &= -V_0'(q) - \sum_k C_k q_k \\ m_k \ddot{q}_k &= -m_k \omega_k^2 q_k - C_k q \end{aligned}$$

Definindo a transformada

$$\dot{q}_k(s) = \int_0^\infty e^{-st} q_k(t) dt$$

e analogamente para $\dot{q}(s)$, temos das equações para q_k

$$\dot{q}_k(s) = \frac{\dot{q}_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} + \frac{s q_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} - \frac{C_k}{m_k} \frac{\dot{q}(s)}{s^2 + \omega_k^2}$$

Tomando a transformada inversa e substituindo a solução $q_k(t)$ na equação de movimento para a partícula de interesse, temos, após algumas manipulações:

$$\begin{aligned} M \ddot{q} + V_0'(q) &= \sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} q + \sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \frac{s^2 \dot{q}(s)}{s^2 + \omega_k^2} e^{st} ds = \\ &= \sum_k C_k \left\{ q_k(0) \cos \omega_k t + \frac{\dot{q}_k(0)}{\omega_k} \sin \omega_k t \right\} \end{aligned} \quad (1.4)$$

São três os termos que aparecem devido ao acoplamento da partícula de interesse ao banho de osciladores. O terceiro termo do lado esquerdo de (1.4) é gerado por um potencial de renormalização V_0 dado por

$$\Delta V = -\frac{1}{2} \sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} q^2 \ .$$

Vemos que ao acoplarmos uma partícula sujeita a um potencial $V_0(q)$ a um banho de osciladores, coordenada a coordenada, este potencial é corrigido pelo termo harmônico ΔV .

O quarto termo do lado esquerdo pode ser reescrito como

$$\frac{d}{dt} \left\{ \sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \frac{s \tilde{q}(s)}{s^2 + \omega_k^2} e^{st} ds \right\}$$

que, usando-se o teorema da convolução, leva a

$$\frac{d}{dt} \sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \int_0^t \cos \omega_k(t-t') q(t') dt' .$$

Para interpretar este termo é preciso introduzir-se a noção de densidade espectral do conjunto de osciladores, $J(\omega)$. Esta função permitirá que as somas discretas se transformem em integrais. Desde já, observe-se que isto implica em considerar um número infinito de osciladores. Seja

$$J(\omega) = \sum_k \frac{C_k^2}{2m_k \omega_k} \delta(\omega - \omega_k) \quad (1.5)$$

que permite escrever o último termo do lado esquerdo de (1.4) como

$$\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{J(\omega)}{\omega} \cos \omega(t-t') d\omega$$

Na verdade, a densidade espectral é dada pela parte imaginária da transformada de Fourier da susceptibilidade dinâmica do banho

$$J(\omega) = \text{Im } \mathcal{F}(-i\langle[C_k q_k(t), C_k q_k(t')]\rangle)$$

com $t > t'$.

A escolha da densidade espectral é feita de modo que o último termo do lado esquerdo de (1.4) resulte no termo dissipativo. Assume-se que $J(\omega)$ seja da forma

$$J(\omega) = \begin{cases} \eta\omega & \text{se } \omega < \Omega \\ 0 & \text{se } \omega > \Omega \end{cases} \quad (1.6)$$

em que Ω é muito maior que as frequências características do sistema de interesse. Logo

$$\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{J(\omega)}{\omega} \cos \omega(t-t') d\omega = \frac{2}{\pi} \eta \frac{\sin \Omega(t-t')}{t-t'} \approx 2\eta \delta(t-t')$$

em que, na última igualdade, toma-se o limite $\Omega \rightarrow \infty$. Segue que o último termo do lado esquerdo resulta em

$$\frac{d}{dt} \left\{ \int_0^t 2\eta \delta(t-t') q(t') dt' \right\} = \eta \dot{q}(t) ,$$

o termo de fricção.

Os termos do lado direito da equação (1.4) são a solução dos osciladores desacoplados. Funcionam como uma força randômica, $f(t)$, de média nula e correlação delta, chamado ruído branco, uma vez que o banho esteja inicialmente em equilíbrio termodinâmico — hipótese já usada na construção do modelo:

$$\begin{aligned} \langle q_k(0) \rangle &= \langle \dot{q}_k(0) \rangle = \langle q_k(0) \dot{q}_{k'}(0) \rangle = 0 \\ \langle q_k(0) q_{k'}(0) \rangle &= \frac{kT}{m_k \omega_k^2} \delta_{kk'} \quad \text{e} \quad \langle \dot{q}_k(0) \dot{q}_{k'}(0) \rangle = \frac{kT}{m_k} \delta_{kk'} \end{aligned}$$

o que resulta para $f(t)$

$$\langle f(t) \rangle = 0 \quad \text{e} \quad \langle f(t) f(t') \rangle = 2\eta kT \delta(t-t') .$$

Portanto, a equação de evolução para o sistema de interesse é uma equação de Langevin.

Além da hipótese do equilíbrio termodinâmico, é importante mencionar como um conjunto de equações reversíveis no tempo resultou, para o sistema de interesse, numa equação irreversível. A situação é semelhante à solução proposta para o paradoxo de Zermelo, que objetava à própria teoria cinética clássica o fato de o conjunto de moléculas, do ponto de vista microscópico, estar sujeito apenas a processos reversíveis. Em geral, um sistema dinâmico Hamiltoniano retorna tão próximo quanto se queira do seu estado inicial,

no espaço de fases, uma vez que esteja confinado a uma região limitada deste. Este resultado é conhecido como teorema de recorrência de Poincaré e chamam-se ciclos de Poincaré aos ciclos que o ponto, representativo do estado de um sistema dinâmico, realiza no espaço de fases.

Retomando, a solução do paradoxo está no fato de os ciclos de Poincaré terem um período muito grande, muito maior que o tempo de observação para sistemas com tantos graus de liberdade (da ordem do número de Avogadro). No caso presente, estes ciclos tornam-se indefinidamente longos na medida em que tomamos um conjunto contínuo de osciladores.

1.2 O modelo do reservatório caótico

O estudo dos efeitos sobre um sistema lento da dinâmica de um sistema caótico partiu do resultado de Ott [4] acerca da invariância adiabática do volume contido numa superfície de energia do sistema caótico. O quanto este volume deixa de ser constante obedece uma lei difusiva, uma equação como (0.1) que discutiremos abaixo.

Na mesma linha, Brown, Ott e Grebogi [10] estudaram numericamente a questão, verificando as previsões de Ott, baseadas numa *análise de escalas de tempo múltiplas*. Esta técnica é corrente em problemas em que um sistema rápido e um lento coexistem. São introduzidas no mínimo duas escalas de tempo, através de variáveis temporais distintas $\tau_1 = t$ e $\tau_2 = \epsilon t$, em que $\epsilon \ll 1$ é o parâmetro de lentidão do sistema de interesse, que pode ser pensado como a razão das massas do sistema lento pela do sistema caótico. Assim, enquanto τ_1 varia de ordem 1, τ_2 varia apenas de ordem ϵ : τ_1 é o tempo do sistema rápido e τ_2 é o tempo do sistema lento.

Como já mencionamos na introdução, em geral, um problema que apresenta difusão está normalmente relacionado a uma equação tipo Langevin. Coube a Wilkinson [2] explicitar que a variável que estava a perturbar o sistema caótico sofre uma força de reação dissipativa. Mais tarde, Berry e

Robbins [3] estudaram o problema com mais detalhe e formalismo, obtendo as forças de Born Oppenheimer, análoga à gerada pelo potencial renormalizador da seção anterior, e uma força proporcional à velocidade, como a dissipativa. Veremos a seguir que esta tem também uma componente geométrica, que se relaciona com a fase de Berry [12].

Todos estes resultados embutem uma dependência temporal na Hamiltoniana uma vez que à partícula lenta é atribuída uma dinâmica de parâmetro variado externamente. Evitamos esta construção porque entendemos que a dissipação precisa ter uma energia bem caracterizada, no caso a energia do sistema lento. A maneira como o fazemos será exposta no próximo capítulo.

O modelo do reservatório caótico explora em grande medida a hipótese adiabática. O ponto de partida é um ensemble microcanônico de sistemas caóticos acoplado a um sistema que é lento comparado ao sistema caótico. Como no tratamento anterior, o foco de atenção é na dinâmica de uma parte do universo, o subsistema lento, que pode portanto continuar a ser chamado de sistema de interesse.

Na aproximação adiabática, o acoplamento provoca o aparecimento de um potencial gerador da força de Born-Oppenheimer. Este resultado é de ordem zero no parâmetro de lentidão do sistema de interesse. Em primeira ordem, duas outras forças de reação comparecem, ambas proporcionais à velocidade da partícula de interesse. A primeira é como uma força magnética, determinada por Berry e Robbins [3]. O campo que a gera é a 2 forma relacionada com a fase geométrica do sistema caótico [13].

A segunda foi calculada por Wilkinson pela primeira vez, apenas tomando como ponto de partida o resultado de Ott [4], sobre o volume contido na superfície de energia de um sistema caótico ser um invariante adiabático ergódico. Explicitamente, seja

$$\Omega(\mathbf{z}, t) = \int d\mathbf{p} \, d\mathbf{q} \Theta(E(\mathbf{z}) - h(\mathbf{q}, \mathbf{p}; \mathbf{z})) \, , \quad (1.7)$$

em que Θ é a função degrau de Heaviside, $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ são as variáveis de posição e momento do sistema rápido e $\mathbf{z}$ é a coordenada do sistema lento. Note que

Ω depende de t através de $\mathbf{z} = \mathbf{z}(ct)$, que aqui é encarado como parâmetro externo. Portanto, temos que a relação

$$\Omega(z, t) \approx \text{constante}$$

na escala de tempo rápida, implica na força de Born-Oppenheimer. Ocorre que ela não é exatamente válida, e sua violação tem um comportamento difusivo na energia

$$\langle \Delta E^2 \rangle = 2Dt \ ,$$

em que $\Delta E = E(z) - E_f(z)$ e $E(z)$ é a energia do sistema prevista pela constância de $\Omega(z, t)$, que chamaremos *energia adiabaticamente regrada*, e $E_f(z)$ é a energia de fato, obtida se evoluirmos cada condição inicial num ensemble microcanônico de sistemas.

A força determinada por Wilkinson, chamada *fricção determinística*, desaparece quando o sistema rápido é integrável, justamente porque o caráter difusivo de $\langle \Delta E^2 \rangle$ é próprio do sistema caótico. O adjetivo ‘determinístico’ é proposital, procurando enfatizar que nenhum limite termodinâmico é necessário para se chegar a esta fricção, e porque ela surge do caos determinístico em sistemas rápidos com poucos graus de liberdade.

Um comentário se faz necessário neste momento acerca do que pode significar “limite termodinâmico” aqui, em distinção ao tratamento de Caldeira-Leggett. É evidente que tomar-se um *ensemble microcanônico* de sistemas caóticos significa trabalhar dentro da termodinâmica clássica. No entanto, a este arranjo atribuímos uma energia finita. Já no caso do banho de osciladores, uma vez que se toma o limite contínuo de frequências, tem-se um crescimento sem limite de graus de liberdade, que pode permitir o aumento ilimitado da energia total do banho¹. Acredito que é neste sentido que o limite termodinâmico aqui é dito *inexistir*.

¹Do ponto de vista do tratamento de Caldeira-Leggett, o que realmente importa para a absorção de energia são as excitações a partir do estado fundamental do banho, e não o valor da energia deste estado. Credite-se o uso da terminologia de Mecânica Quântica ao fato de o modelo do banho de osciladores ter ali sua fundamentação.

O ponto de partida deste tratamento é uma Hamiltoniana $h(\mathbf{r}, \mathbf{z})$, com $\mathbf{z}$ sendo parâmetros externos que variam lentamente. É necessário que o espaço de parâmetros tenha dimensão maior que 1 para que a força do tipo magnético, relacionada com a fase de Berry, esteja presente. Observe-se que $\mathbf{z} = \mathbf{z}(ct)$. É a modificação desta dinâmica que se vai investigar, uma vez que $\mathbf{z}$ passe a perturbar o movimento do sistema caótico, cujos graus de liberdade serão doravante abreviados como $\mathbf{r} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$.

Vamos agora usar a notação da análise de escalas de tempo múltiplas, $\tau_1 = t$ para o tempo do sistema rápido e $\tau_2 = ct$ para o tempo do sistema lento. Portanto, $h = h(\mathbf{r}, \mathbf{z})$ ou, explicitando a escala de tempo em que h varia, $h = h(\mathbf{r}, \tau_2)$. Ambas as notações aparecerão adiante.

O estado do sistema caótico é tomado como uma distribuição no espaço de fases $\rho(\mathbf{r}; t)$ normalizada

$$\int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}; t) = 1$$

Assim, a evolução do ensemble ρ é determinada pela equação de Liouville

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}; t)}{\partial t} = \{h(\mathbf{r}, \tau_2), \rho(\mathbf{r}; t)\} , \quad (1.8)$$

sujeita à condição inicial

$$\rho(\mathbf{r}; 0) = \frac{\delta(E(0) - h(\mathbf{r}, 0))}{\Sigma(E, 0)} . \quad (1.9)$$

em que Σ denota a área da superfície de energia, definida como a derivada com respeito à energia do volume

$$\Omega(E, \mathbf{z}(\tau_2)) = \int d\mathbf{r} \Theta(E - h(\mathbf{r}, \tau_2)) . \quad (1.10)$$

A escolha da distribuição inicial sobre a superfície de energia usa o fato de que ela é um subspaço invariante sob o fluxo. Inicialmente ρ é uma densidade microcanônica.

O que se vai determinar é a força de reação do sistema caótico sobre o sistema de interesse:

$$\mathbf{F} = - \int d\mathbf{r} \rho \nabla h \, . \quad (1.11)$$

em que ∇ denota o gradiente com respeito às variáveis lentas $\mathbf{z}$.

Expandindo ρ numa série de potências do parâmetro ϵ , temos

$$\rho(\mathbf{r}; t) \equiv \rho_0(\mathbf{r}; \tau_2) + \epsilon \rho_1(\mathbf{r}; \tau_1, \tau_2) + O(\epsilon^2) \, .$$

Conforme já dissemos, as variáveis de tempo τ_1 e τ_2 são tratadas como variáveis independentes. Como tais, a derivada com respeito a t em (1.8) se torna $\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \tau_1} + \epsilon \frac{\partial}{\partial \tau_2} + O(\epsilon^2)$. Usando este fato, a equação (1.8) fornece as equações para ρ_0 e ρ_1 :

$$\{\rho_0, h\} = 0 \quad (1.12)$$

$$\frac{d\rho_1}{d\tau_1} - \frac{\partial \rho_1}{\partial \tau_1} + \{\rho_1, h\} = - \frac{\partial \rho_0}{\partial \tau_2} \, , \quad (1.13)$$

e analogamente para ρ_r , $r \geq 2$.

Portanto ρ_0 é constante num subspaço invariante da dinâmica caótica, com $\mathbf{z}$ congelado

$$\rho_0(\mathbf{r}, \tau_2) = \frac{\delta(L(\mathbf{z}) - h(\mathbf{r}, \mathbf{z}))}{\Sigma(L, \mathbf{z})} \, , \quad (1.14)$$

em que a dependência de ρ_0 com τ_2 está implícita na variável lenta $\mathbf{z}$.

Seja $\hat{h} = h(\mathbf{r}, \mathbf{z}) - E(\mathbf{z})$ a flutuação da função hamiltoniana rápida em torno da energia adiabaticamente regrada. Observe-se que

$$E(\mathbf{z}) = \langle h(\mathbf{r}, \mathbf{z}) \rangle_E \, ,$$

em que introduziu-se a notação de média de ensemble

$$\langle \cdots \rangle_E = \int d\mathbf{r} \rho_0(\mathbf{r}; \tau_2) \cdots = \frac{1}{\Sigma} \int d\mathbf{r} \delta(E - h(\mathbf{r}, \mathbf{z})) \cdots \, . \quad (1.15)$$

Portanto, $\langle \nabla \hat{h} \rangle_{E(\mathbf{z})} = 0$. A força $\mathbf{F}$ pode ser reescrita como

$$\mathbf{F} = - \int d\mathbf{r} \rho \nabla h = - \left(\int d\mathbf{r} \rho \right) \nabla E - \int d\mathbf{r} (\rho_0 + \epsilon \rho_1 + O(\epsilon^2)) \nabla \hat{h} \, .$$

Como ρ é normalizado e o segundo termo se anula, tem-se até primeira ordem em ϵ :

$$\mathbf{F} = -\nabla E(\mathbf{z}) + \epsilon E_1, \quad \text{em que} \quad E_1 \equiv -\int d\mathbf{r} \rho_1 \nabla \hat{h}.$$

O termo de ordem zero é a força de Born-Oppenheimer. Para encontrar o termo de primeira ordem em ϵ , é preciso determinar-se ρ_1 .

Com ρ_0 dado pela eq.(1.14), resolve-se (1.13) pelo método das características [14], obtendo-se

$$\rho_1 = -\int^{\tau_1} \frac{\partial \rho_0}{\partial \tau_2}(\mathbf{r}^-(\tau'_1); \tau_2) d\tau'_1, \quad (1.16)$$

em que a integração é feita para $\tau'_1 < \tau_1$ e a órbita $\mathbf{r}^-(\tau'_1)$ representa soluções das equações de Hamilton da Hamiltoniana congelada $h(\mathbf{r}; \tau_2)$ que, no tempo $\tau'_1 = \tau_1$, satisfazem a *condição final* $\mathbf{r}^-(\tau_1) = \mathbf{r}$. São soluções que caminham para trás no tempo (note a importância da independência das variáveis τ_1 e τ_2 aqui).

Pode-se adicionar a ρ_1 qualquer função, digamos f_1 , que seja solução da equação homogênea $\{h, f\} = 0$. Esta será necessariamente uma função de h , pois h é a única constante de movimento.

Portanto, a primeira correção à densidade microcanônica é dada por

$$\rho_1(\mathbf{r}; \tau_1, \tau_2) = -\int_0^{\tau_1} d\tau'_1 \frac{\partial}{\partial \tau_2} \rho_0[\mathbf{r}^-(\tau'_1); \tau_2] + f_1[h(\mathbf{r}; \tau_2)]. \quad (1.17)$$

A força produzida por f_1 será negligenciada no que segue, porque os resultados a respeito de f_1 indicam que ela é um termo de memória, mas que não depende da velocidade [15]. Além disto, nossos resultados numéricos mostram *a posteriori* que este termo tem pouca importância.

Substituindo a expressão de ρ_0 na de ρ_1 e usando que

$$\frac{\partial}{\partial \tau_2} \rho_0 = -\dot{\mathbf{z}} \cdot \left\{ \frac{1}{\Sigma} [\partial_E \delta(E - h)] (\nabla \hat{h})_{-\tau'_1} - \frac{\rho_0}{\Sigma} \partial_{\tau_2} \Sigma \right\},$$

obtem-se

$$\rho_1 = \dot{\mathbf{z}} \cdot \frac{1}{\Sigma} \int_0^{\tau_1} d\tau [\partial_E \delta(E - h)] (\nabla \hat{h})_{-\tau} + (\cdots) + f_1(h, t), \quad (1.18)$$

em que

$$(\nabla \dot{h})_{- \tau} = \nabla \dot{h}(\mathbf{r}^-(\tau), \mathbf{z})$$

e o termo anotado por $(\dots)$ é proporcional a $\delta(E - h)$ e não contribui para a força F_1 .

Da expressão para F_1 , tem-se que ela pode ser escrita como a integral no tempo de uma função de correlação das variáveis rápidas, com $\mathbf{z}$ congelado, dos gradientes da Hamiltoniana rápida, isto é, uma autocorrelação da força generalizada. Denotando por $\mathbf{C}$ este vetor correlação, tem-se

$$\mathbf{C}(\tau) = \langle (\nabla \dot{h})_{- \tau} (\nabla \dot{h}) \rangle_E . \quad (1.19)$$

Notando que as correlações são funções pares do tempo, tem-se

$$\mathbf{C}(\tau) = \langle (\nabla \dot{h})(\nabla \dot{h})_{\tau} \rangle_E .$$

Pretende-se calcular o efeito da força F_1 para tempos da ordem de $1/\epsilon$. Supondo que o sistema caótico é mixing, as correlações decaem rápido o suficiente para aproximarmos, $\tau_1 \sim 1/\epsilon$

$$\int_0^{\tau_1} \mathbf{C}(t) dt \approx \int_0^{\infty} \mathbf{C}(t) dt .$$

Assim,

$$F_1 = -\dot{\mathbf{z}} \cdot \frac{1}{\Sigma} \partial_E \left[\Sigma \int_0^{\infty} d\tau \mathbf{C}(\tau) \right] \quad (1.20)$$

$$= -\mathbf{K} \cdot \dot{\mathbf{z}} \quad (1.21)$$

em que

$$K_{ij} = \frac{1}{\Sigma} \partial_E \left[\Sigma \int_0^{\infty} d\tau C_{ij}(\tau) \right] . \quad (1.22)$$

Para interpretar este resultado, decompõe-se K_{ij} em suas partes simétrica e anti-simétrica

$$K_{ij}^s = \frac{1}{2}(K_{ij} + K_{ji}) , \quad K_{ij}^a = \frac{1}{2}(K_{ij} - K_{ji}) .$$

A força que corresponde à parte anti-simétrica é o magnetismo geométrico. De fato,

$$F_1^a = \dot{\mathbf{z}} \wedge \mathbf{B}(\mathbf{z}) \ ,$$

em que o ‘campo magnético’ é dado por

$$\mathbf{B}(\mathbf{z}) = -\frac{1}{2\Sigma} \partial_E \left[\Sigma \int_0^\infty d\tau \langle (\nabla \dot{h})_\tau \wedge \nabla \dot{h} \rangle_E \right] \ , \quad (1.23)$$

Esta é precisamente a expressão obtida anteriormente em [13] como o limite clássico da 2-forma da fase geométrica. Mostra-se que $\mathbf{B}$ se anula quando a dinâmica caótica possui simetria por reversão temporal.

A parte simétrica da força de primeira ordem é a fricção determinística. No estudo desta tese, o equivalente à Hamiltoniana caótica $h(\mathbf{r}, \mathbf{z})$ trará um sistema lento com apenas um grau de liberdade, pois estaremos dirigindo nossa atenção a uma verificação numérica deste atrito determinístico.

Capítulo 2

Caos clássico como um ambiente para a dissipação

Neste capítulo, aplicamos a teoria do acoplamento de um sistema lento a um reservatório caótico. Nosso tratamento difere desde o início daquele exposto na seção 1.2 por considerarmos um contexto de universo fechado:

$$\mathcal{S} \dagger \mathcal{R} \ ,$$

em que $\mathcal{S}$ denota um sistema de interesse, que será lento, $\mathcal{R}$ denota um sistema com dois graus de liberdade, que será rápido. A diferença está no fato de que $\mathcal{S}$ terá uma dinâmica inclusa na Hamiltoniana total do universo $\mathcal{S} \dagger \mathcal{R}$.

Como se verá adiante, para interpretar completamente os resultados numéricos, vamos usar uma teoria de espaços de Hilbert em Mecânica Clássica, indo portanto além da teoria adiabática. Estudamos posteriormente a necessidade da hipótese adiabática para haver dissipação. Atravessando a aproximação adiabática, chegamos a um paralelo com o modelo do banho de osciladores.

Inicialmente, consideramos o sistema rápido como o potencial NELSON, estudado em grande detalhe por Barranger e Davies [16]. Este sistema apre-

senta um regime razoavelmente regular para energias baixas, menores ou da ordem de 0.02, e um regime caótico para energias maiores ou da ordem de 0.3. Para energias em torno de 0.1, ele é misto, apresentando um mar caótico cercado algumas ilhas de estabilidade.

O potencial NELSON constitui assim um sistema rápido adequado para verificarmos que a dissipação é causada pelo caos. Mostramos que, na região integrável, o acoplamento só faz acrescentar um potencial adiabático ao sistema lento. O sistema lento escolhido é um potencial quártico unidimensional. Seu período desacoplado é da ordem de 100 vezes maior que o período da órbita periódica mais curta do potencial NELSON. Na verdade, o que caracteriza a rapidez do sistema rápido é a função de autocorrelação, apresentada na seção 1.2.

Posteriormente, e uma vez estabelecida a equação *à la* Langevin para a evolução média do sistema lento, refazemos o problema numérico substituindo o NELSON por quatro bilhares caóticos, um de cada vez. Isto constitui um segundo teste para a teoria. Além disso, constatando que a autocorrelação da força generalizada do sistema caótico sobre o sistema lento é o que mais importa nos efeitos do acoplamento, os bilhares têm suas dimensões adequadamente escolhidas para verificar os diferentes comportamentos do sistema lento.

Em qualquer caso, a Hamiltoniana do universo é escrita na forma

$$H = H_c + H_i + H_z \ , \quad (2.1)$$

em que H_c é a Hamiltoniana do sistema rápido, H_i uma Hamiltoniana de interação e H_z é a Hamiltoniana do sistema lento. Esta última escolhemos como um potencial quártico unidimensional:

$$H_z = \frac{p_z^2}{2M_z} + \frac{\lambda}{2}z^2 + \beta z^4 \ . \quad (2.2)$$

Para fazer com que a variável dinâmica z varie lentamente, basta tomarmos $\beta/M_z \ll 1$, se $\lambda = 0$, ou $\lambda/M_z \ll 1$ se $\beta \gtrsim 0$. Escolhemos $M_z = 100$, $\lambda = 0$

e $\beta = 4 \times 10^{-4}$ para todos os resultados desta tese, exceto para a figura 2.25. Portanto z faz o papel de um parâmetro adiabático para a função Hamiltoniana $h := H_c + H_i$.

2.1 O modelo com o potencial NELSON

A Hamiltoniana do sistema rápido e a de interação neste caso são dadas por

$$H_c(x, y, p_x, p_y) = \frac{p_x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2} + (y - \frac{x^2}{2})^2 + \frac{\mu}{2}x^2 \quad (2.3)$$

$$H_i = \gamma x z. \quad (2.4)$$

O valor do parâmetro μ é 0.1 em toda esta tese.

O módulo do parâmetro de acoplamento, γ , e os parâmetros do sistema de interesse β e λ estão relacionados. Para $\beta = 0$, é fácil ver que um acoplamento muito forte tornaria o sistema z ilimitado. Como veremos a seguir, a relação

$$\gamma < \sqrt{\lambda\mu}$$

deve ser satisfeita. Trabalhando com o oscilador harmônico como sistema lento, o acoplamento acaba por ficar de tal forma limitado que seus efeitos são muito pequenos para serem observados. O acoplamento na direção y não apresenta generalidade maior que este utilizado, porque o eixo x não é um eixo de simetria do movimento, com o acoplamento. Isto já não ocorre no caso do bilhar de Bunimovich. O potencial adiabático é mais complicado se introduzimos aqui um termo yz .

Introduzimos o termo quártico no potencial do sistema unidimensional para garantir que o movimento ali sempre seja limitado.

Lembramos que estaremos fazendo médias de ensemble para obter o que chamaremos *movimento médio* da coordenada lenta: $(\langle z \rangle, \langle p_z \rangle)$. Uma maneira consistente de apagar as flutuações devidas a uma condição inicial específica na superfície de energia do universo é fazer médias com uma densi-

dade microcanônica *reduzida*:

$$\rho(z, p_z, 0) = \frac{\delta(E - H)}{\Sigma(E, z, p_z)} , \quad (2.5)$$

em que as variáveis lentas entram como parâmetro e Σ é uma constante de normalização.

Esta densidade microcanônica corresponde a uma superfície de energia do sistema rápido para z e p_z fixos, no instante inicial. Isto é fácil de ver observando a igualdade:

$$E = H_c(x, y, p_x, p_y) + H_i(x, z_0) + H_z(z_0, p_{z0}) .$$

Como não estamos interessados diretamente na dinâmica rápida, mas apenas no seu efeito médio sobre o sistema lento, a idéia é tomarmos todas as condições iniciais possíveis, com a mesma energia, e verificar seu efeito médio sobre o sistema de interesse. A irrelevância da condição inicial do sistema rápido é fundamental para o modelamento desta densidade microcanônica numericamente.

O princípio que, de fato, orienta a definição da densidade microcanônica reduzida é o chamado *princípio da indiferença* [17], que equivale a tomarmos todas as condições iniciais numa superfície de energia em pé de igualdade. Numericamente só utilizamos um número finito de condições iniciais. A convergência das médias, para um número cada vez maior de condições iniciais, legitima o procedimento. Como não existe uma hierarquia nas condições iniciais, a média que se faz é a média aritmética. O conjunto de pontos para o cálculo numérico, *grid de pontos*, é uniformemente distribuído na superfície de energia do sistema rápido.

O volume contido na superfície de energia do sistema rápido, Ω , é o invariante adiabático. Na medida que o tempo t passa, a superfície de energia inicial vai se deformando. Como z e p_z deixam de ser constantes para $t > 0$, os pontos do grid nem sequer estarão numa mesma superfície de energia do sistema rápido. Estarão apenas na superfície de energia total $E = H$, mas

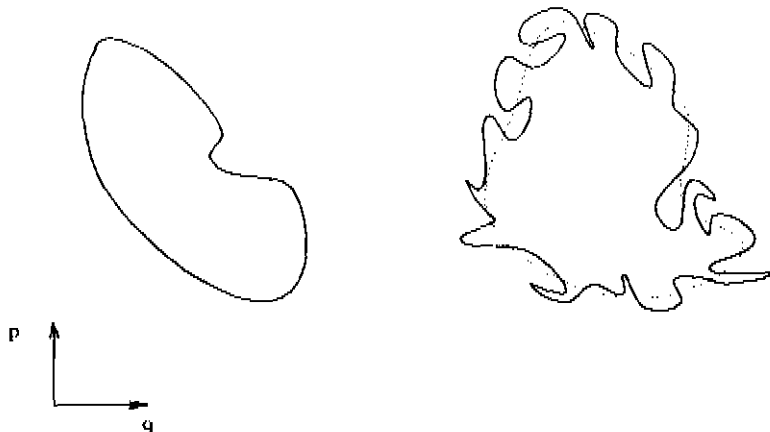


Figura 2.1: Esquema da superfície de energia do sistema rápido onde tomamos as condições iniciais. À direita, a curva cinza representa uma nova superfície de energia obtida através da invariância adiabática do volume que a curva à esquerda envolve. A curva enrugada esquematiza o que de fato acontece com os pontos da superfície inicial, para além da aproximação adiabática.

permanecerão próximos de uma superfície obtida pela invariância adiabática do volume Ω .

A determinação de Ω para o potencial NELSON é particularmente simples porque H_c é uma soma de quadrados:

$$\Omega(E, z, p_z) = \int \Theta(E - H) \, dx \, dy \, dp_x \, dp_y \quad (2.6)$$

Da equação acima, decorre que Ω , a constante de normalização da densidade microcanônica reduzida, é dada por $\Omega = \partial_E \Omega$. Fazendo a mudança de variáveis

$$x = \sqrt{\frac{2}{\mu}} s \cos \theta - \frac{\gamma z_0}{\mu} \, , \quad (2.7)$$

$$y = \frac{x^2}{2} + s \sin \theta \, , \quad (2.8)$$

$$p_x = \sqrt{2} r \cos \phi \, , \quad (2.9)$$

$$p_y = \sqrt{2} r \sin \phi \quad (2.10)$$

com

$$s^2 + r^2 = E' , \quad (2.11)$$

$$E' = E - H_S(z_0, p_{z_0}) + \frac{\gamma^2}{2\mu} z_0^2 , \quad (2.12)$$

$$s = \sqrt{E'} \cos \xi \quad r = \sqrt{E'} \sin \xi \quad (2.13)$$

temos

$$\Omega(E, z, p_z) = 2\pi^2 \sqrt{\frac{2}{\mu}} \left[E - \beta z^4 - \frac{\lambda z^2}{2} - \frac{p_z^2}{2M} + \frac{\gamma^2 z^2}{2\mu} \right]^2 . \quad (2.14)$$

Em (2.14), z e p_z são lidos como parâmetros. A relação

$$\Omega \approx \text{constante} \implies H_z = \frac{\gamma^2 z^2}{2\mu} \approx \text{constante}$$

fornece o potencial adiabático do movimento lento:

$$V_r(z) = -\frac{\gamma^2 z^2}{2\mu} \quad (2.15)$$

que é o de um oscilador invertido. O potencial V_r dá a correção de ordem zero no movimento do sistema lento. Saliente-se que não fixamos a energia do potencial NELSON para este cálculo. Portanto V_r independe do regime do sistema rápido, seja ele caótico, regular ou misto.

A determinação de V_r permite-nos retomar a discussão a respeito da escolha de γ . No caso do oscilador, $\beta = 0$, o potencial acrescido do termo adiabático só confina a partícula lenta se $\lambda - \frac{\gamma^2}{\mu} > 0$. Além do que já foi discutido, o módulo de γ tem de ser tal que o acoplamento seja perturbativo, principalmente para que o sistema NELSON não sofra mudanças muito grandes em sua energia.

No esquema na fig.(2.1), esta idéia se traduz no fato de que a curva enrugada não pode se afastar demais da superfície com a energia adiabaticamente regrada. Caso isto não seja satisfeito, alguns pontos do grid poderão mudar do regime regular para o caótico ou vice-versa. Mesmo no caso dos bilhares,

em que o regime é caótico independentemente da energia, este cuidado deve ser tomado porque as correlações mudam para diferentes energias (adiante se justificará o papel das correlações).

Portanto, a condição de acoplamento fraco, não mencionada no tratamento de Berry e Robbins, se faz necessária. Ocorre que o sistema rápido precisa se comportar como um reservatório e para tanto sua energia deve ser bem maior que a do sistema lento. Isto é realizado escolhendo a energia inicial do sistema lento bem menor que a energia total do universo. Tipicamente, $E_{zr} = O(10^{-3})$ enquanto que $E \geq O(10^{-2})$. A energia E_{zr} assim baixa inclusive ajuda a fazer do grau z um sistema bem lento, com período da ordem de 1000, quando desacoplado.

Outro ponto importante é a escolha do integrador numérico. Os erros da integração numérica usualmente permitem um afastamento do valor da energia total E . Este é o caso da família de integradores Runge-Kutta. Obviamente a manutenção da energia total constante é imprescindível num estudo de dissipação. A idéia do método de integração numérica usado é apresentada no apêndice 1. Trata-se de um integrador simplético de sexta ordem [18, 19], que tem a garantia (também checada a cada passo) de que a energia total é conservada. A variação permitida, em relação à energia total, é da ordem de 10^{-7} para todos os gráficos mostrados. O módulo máximo do potencial adiabático e de outras forças que veremos surgir na aplicação do modelo são significativamente maiores para serem identificados.

O período de referência T é calculado para o movimento desacoplado, mas considerando a influência do potencial V_r . Para os primeiros quatro gráficos, $T = 1176$ e a constante de acoplamento $\gamma = 6 \times 10^{-3}$. O número de condições iniciais, já com teste de convergência, varia de um gráfico para outro. Note que a convergência tem que ver com a caoticidade do NELSON. Aliado a isto, e neste caso particular, vemos que o módulo da força flutuante atuando no sistema lento cresce com a energia total, o que faz com que o número de pontos no grid seja maior quanto maior é a energia total.

Começamos pelo regime integrável no NELSON. Para $E_{zr} = 2.87 \times 10^{-3}$

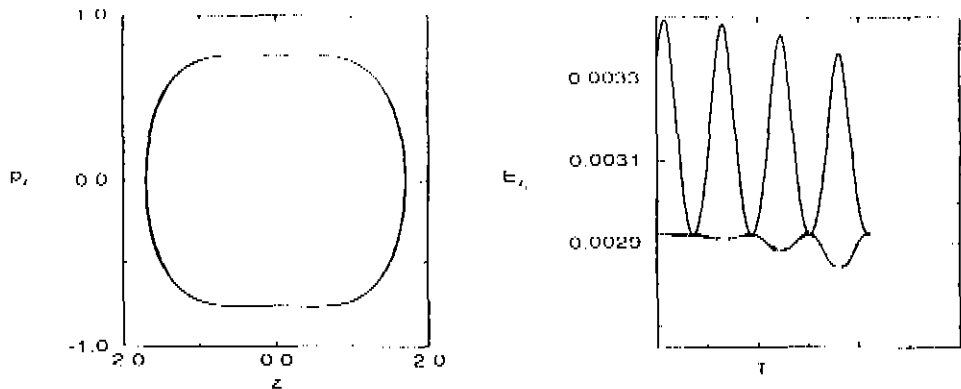


Figura 2.2: (a) A projeção do movimento médio no plano de fase das coordenadas do sistema de interesse para $E = 0.04$ e $(z_0, p_{z0}) = (1.5, 0.5)$. (b) A energia do sistema lento, E_z , em função do tempo é a curva oscilante, enquanto a energia adiabática $E_{zr} = E_z + V_r$ é razoavelmente constante por toda a evolução. Na abscissa, T denota um período. A energia total $E = 0.04$ coloca o potencial NELSON num regime regular. O número de condições iniciais é 1500.

no instante inicial e energia total $E = 0.04$, temos a figura 2.2. Vemos que o movimento do gran lento é praticamente periódico e que há uma contri-buição de Born Oppenheimer para a sua energia, pois enquanto E_z oscila, E_{zr} permanece praticamente constante, como esperado.

Para a energia total $E = 0.08$, o NELSON já apresenta muitas áreas de instabilidade em suas seções de Poincaré ([16] e veja também fig.5.5 de [20]). Vemos, na figura (2.3), caracterizar-se uma oscilação de amplitude crescente com o tempo. Isto se deve primeiramente ao fato de a força $-\gamma x$ em cada condição inicial ser maior em módulo. A difusão de $z_i(t)$ é maior quanto maior o tempo e quanto maior a energia. Ainda não fica clara a dissipação.

Para a energia total $E = 0.38$, o NELSON já é completamente caótico. Na figura 2.4, plotamos as trajetórias médias no plano de fase do sistema de interesse. Estas curvas mostram claramente o caráter de sorvedouro que o

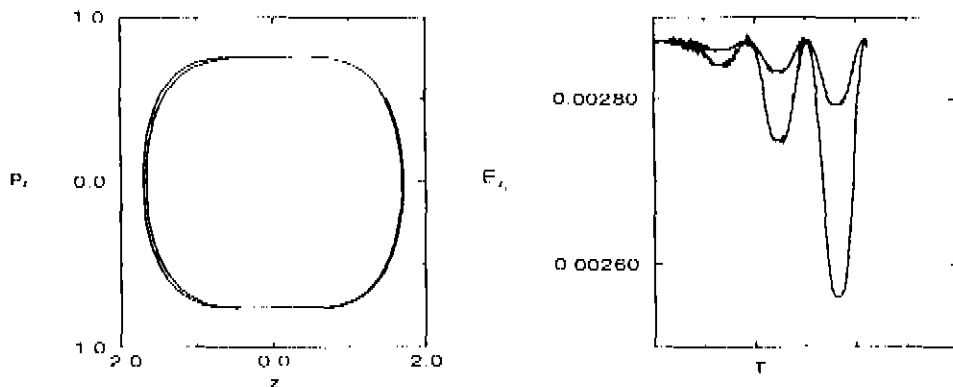


Figura 2.3: (a) A projeção do movimento médio no plano de fase das coordenadas do sistema de interesse para $E = 0.08$ e $(z_0, p_{z0}) = (1.5, 0.5)$. (b) Comparação das energias adiabáticas E_{z_T} para diferentes regimes do NELSON. A curva com amplitude maior de oscilação foi calculada com energia total $E = 0.08$, que deixa o NELSON num regime misto. Nesta, o número de condições iniciais é 2160. A outra curva é a mesma energia adiabática, E_{z_T} , da figura 2.2. Na abscissa de (b), T denota um período.

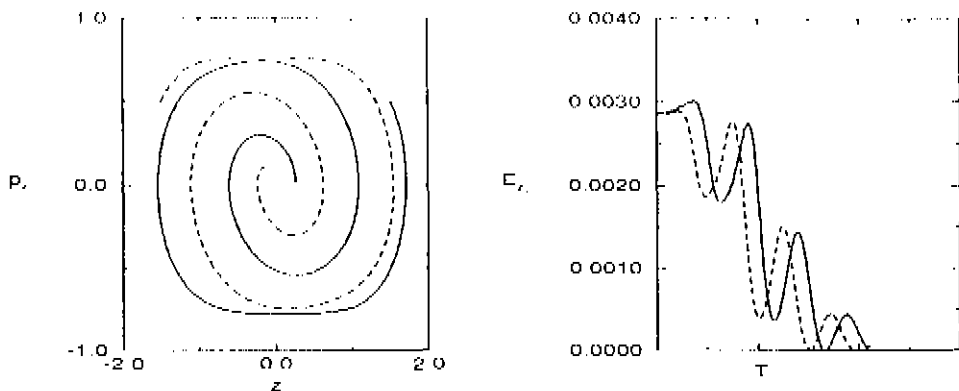


Figura 2.4: (a) A projeção do movimento médio no plano de fase das coordenadas do sistema de interesse para energia total $E = 0.38$. São duas as condições iniciais $(z_0, p_{z0}) = (\pm 1.5, 0.5)$. (b) A energia adiabática do sistema lento E_{zr} como função do tempo. Note-se que a amplitude das oscilações é bem maior do que o potencial de Born-Oppenheimer. O número de pontos no grid para ambas as curvas é 3724. Na abscissa de (b), T denota um período.

ponto fixo na origem se tornou com o acoplamento.

Estes resultados não podem ser explicados através da aproximação adiabática sozinha, por causa das oscilações de E_{zr} no caso caótico. Aparentemente, o fato de o volume da superfície de energia ser constante não é suficiente para que as médias das variáveis de interesse, $\langle z \rangle$ e $\langle p_z \rangle$, obedeçam uma equação basicamente dissipativa.

Imaginar que há um outro potencial atuando, além de $\frac{\gamma^2 \langle z \rangle^2}{2\mu}$, como sugerem as oscilações quase periódicas de E_{zr} , é na verdade inútil, pois vemos na figura 2.4(a) que o comportamento desta energia depende do momento inicial. A amplitude das oscilações evidenciam também que não se poderia explicá-las com o termo de memória oferecido por Jarzynski [15], pois elas não são uma *correção* ao termo de Born-Oppenheimer.

Da figura 2.6, concluímos que a unicidade de soluções é aproximadamente válida para as médias $(\langle z \rangle, \langle p_z \rangle)$. Portanto, os gráficos de E_{zr} como função

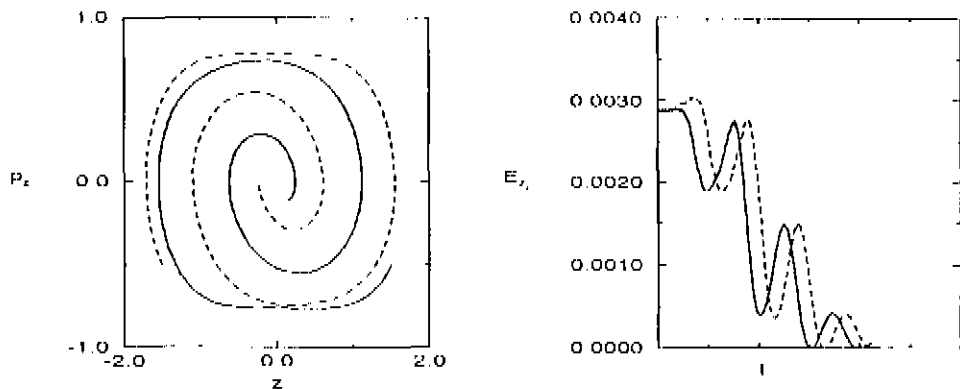


Figura 2.5: Mesmo que a figura anterior (2.4), salvo que as condições iniciais são $(z_0, p_{z0}) = (\pm 1.5, -0.5)$.

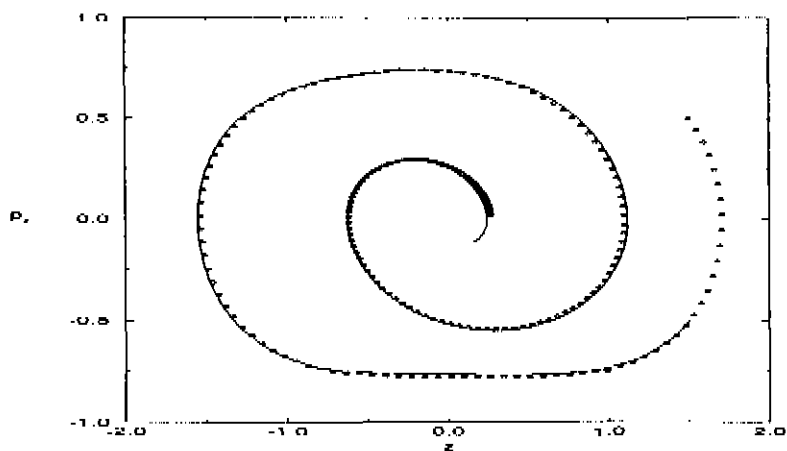


Figura 2.6: Tomando as condições iniciais como $(z_0, p_{z0}) = (1.5, \pm 0.5)$, verificamos que em boa aproximação vale a unicidade de soluções para o movimento médio. A linha contínua é a projeção do movimento médio com a condição inicial $(z_0, p_{z0}) = (1, 5, -0.5)$.

do tempo apresentam apenas uma defasagem temporal, como ilustram as figuras 2.4(b) e 2.5(b).

2.2 Teoria: o reservatório caótico como um banho de osciladores

Na introdução e no primeiro capítulo, chamamos a atenção para o fato de dispormos de duas formulações com semelhantes conclusões. Se se acopla um sistema de interesse a um reservatório, constituído de um conjunto de osciladores [1] ou tido como um sistema caótico [2, 3], observa-se o fluxo da energia para o reservatório vinda do sistema de interesse. Mostramos também que as principais hipóteses de um e outro tratamentos podem ser extraídas do problema do Movimento Browniano [6]. Buscar uma equivalência entre os dois formalismos não é portanto uma linha equivocada por princípio, apesar de não ser imediata.

O ponto de partida desta análise foi a afirmativa de [21] de que dado um sistema de equações de Hamilton, em geral não linear,

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{q}} &= \frac{\partial H_K}{\partial \mathbf{p}} \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\frac{\partial H_K}{\partial \mathbf{q}},\end{aligned}$$

podemos linearizá-lo estudando a evolução temporal de variáveis dinâmicas do sistema Hamiltoniano. Nas equações acima, H_K denota a Hamiltoniana do reservatório com poucos graus de liberdade, que pode ser caótico, misto ou integrável. Dada uma variável dinâmica $f(\mathbf{q}, \mathbf{p})$, sua evolução temporal está dada pela equação

$$U_t f(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0) = f(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$$

sendo U_t é o operador de evolução do sistema Hamiltoniano e $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ o ponto no espaço de fases obtido a partir da evolução de $(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0)$ por um tempo t .

O operador de evolução clássico, U_t , tem relação com o operador de Liouville, $\mathcal{L}$, definido pela relação

$$\mathcal{L}f = [f, H]$$

em que $[,]$ denota o colchete de Poisson. Mostra-se que, se as equações de Hamilton possuem soluções que podem ser estendidas ao infinito no tempo [22], soluções globais, então U_t é unitário e $-i\mathcal{L}$ é auto-adjunto. No capítulo 4, estudamos esta questão com mais profundidade. Em particular, estamos evitando o problema da definição de um produto interno nesta altura, que seria necessário para falarmos de operador auto-adjunto ou unitário.

Superficialmente, as proposições dos dois parágrafos acima são suficientes para concluir se que existe uma base de funções, entre as variáveis dinâmicas, que são autofunções do operador de Liouville, isto é, para as quais

$$-i\mathcal{L}\varphi = \lambda\varphi, \quad (2.16)$$

uma vez que $-i\mathcal{L}$ é auto-adjunto. E como $\mathcal{L}\varphi = \frac{d\varphi}{dt}$, temos as equações

$$\frac{d\varphi_n}{dt} = i\lambda_n\varphi_n \quad (2.17)$$

para as funções de base.

Como mostraremos nos capítulos 3 e 4, este é um resultado bastante geral, independentemente de estarmos tratando o NELSON, que poderia ser substituído por um sistema Hamiltoniano cujas equações de Hamilton tenham soluções globais para qualquer condição inicial. Por isto, só voltaremos a considerar a Hamiltoniana do potencial NELSON, H_N , quando formos aplicar esta teoria aos resultados numéricos.

Consideremos agora φ_n como as funções de base do operador de Liouville associada à Hamiltoniana do reservatório. Podemos separar as partes real e imaginária de φ_k , escrevendo $\varphi_k = u_k + i v_k$ e obtendo

$$\begin{aligned} \frac{du_k}{dt} &= -\lambda_k v_k \\ \frac{dv_k}{dt} &= \lambda_k u_k \end{aligned}$$

Para determinar H_K em termos de u_n e v_n , usamos as relações

$$[u_l, H_K] = -\lambda_l v_l = -[v_l, H_K] = \lambda_l u_l.$$

Portanto podemos escrever H_K na forma

$$\sum_k \frac{\lambda_k}{2} (u_k^2 + v_k^2).$$

Sendo

$$\gamma z h(\mathbf{q}, \mathbf{p})$$

a Hamiltoniana de interação, podemos expressar h em termos das funções u_k e v_k , pois o conjunto $\{\varphi_k : k = 1, 2, \dots\}$ é uma base ortonormal para as variáveis dinâmicas¹. Assim

$$h(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \sum_k C_k \varphi_k = \sum_k (A_k u_k + B_k v_k)$$

em que A_k e B_k são reais. Observe-se que o conjunto $\{u_k, v_k : k = 1, 2, \dots\}$ é também uma base ortonormal das variáveis dinâmicas do reservatório.

Obtemos assim uma função hamiltoniana associada ao conjunto de equações acopladas dada por

$$\mathcal{H} = \sum_k \frac{\lambda_k}{2} (u_k^2 + v_k^2) + \gamma \sum_k (A_k u_k + B_k v_k) z + H_z$$

cujas “equações de Hamilton” são o sistema quase-linear abaixo

$$\dot{u}_k = -\lambda_k v_k - \gamma B_k z \quad (2.18)$$

$$\dot{v}_k = \lambda_k u_k + \gamma A_k z \quad (2.19)$$

$$\dot{z} = -\frac{p_z}{M_z} \quad (2.20)$$

$$\dot{p}_z = -A_z z^3 - \lambda z - \gamma \sum_k (A_k u_k + B_k v_k) \quad (2.21)$$

¹Esta expansão vale sobre uma superfície de energia fixa, mas arbitrária. Esta observação se faz necessária tendo em vista que, por exemplo, a variável dinâmica x não é ‘quadrado integrável’ *a priori*; é como se expressássemos $x\theta(X-x)$.

Aplicando a transformada de Laplace às duas primeiras equações, obtemos

$$\begin{aligned}u_k(t) &= u_k(0) \cos \lambda_k t - v_k(0) \sin \lambda_k t - \gamma \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{(s B_k + \lambda_k A_k) \hat{z}(s)}{s^2 + \lambda_k^2} \right) \\v_k(t) &= v_k(0) \cos \lambda_k t + u_k(0) \sin \lambda_k t - \gamma \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{(\lambda_k B_k - s A_k) \hat{z}(s)}{s^2 + \lambda_k^2} \right)\end{aligned}$$

em que $\mathcal{L}^{-1}$ denota a transformada de Laplace inversa e $\hat{z}(s)$ é a transformada de Laplace de $z(t)$.

A equação de Newton para o sistema lento se torna

$$\begin{aligned}M_z \ddot{z} + \lambda z + 4\beta z^3 &= -\gamma \left\{ \sum_k A_k (u_k(0) \cos \lambda_k t - v_k(0) \sin \lambda_k t) + \right. \\&\quad \left. + \sum_k B_k (v_k(0) \cos \lambda_k t + u_k(0) \sin \lambda_k t) \right\} \\&\quad + \gamma^2 \sum_k \left(A_k^2 + B_k^2 \right) \lambda_k \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{\hat{z}(s)}{s^2 + \lambda_k^2} \right). \quad (2.22)\end{aligned}$$

As duas primeiras somas do lado direito podem ser agrupadas e escritas em termos da solução desacoplada para $h(t)$:

$$\begin{aligned}{}_d u_k(t) &= u_k(0) \cos \lambda_k t - v_k(0) \sin \lambda_k t \\{}_d v_k(t) &= v_k(0) \cos \lambda_k t + u_k(0) \sin \lambda_k t\end{aligned}$$

Temos portanto

$$-\gamma \sum (A_k {}_d u_k(t) + B_k {}_d v_k(t)) = -\gamma h_d(t),$$

em que h_d é obtida a partir da solução particular das equações de Hamilton do reservatório desacoplado, que pode ser vista como uma força flutuante atuando sobre o sistema lento.

A média desta força flutuante no ensemble microcanônico pode resultar, conforme o caso, numa força de Born-Oppenheimer, em vez de se anular.

Obtemos isto expandindo ρ numa série de potências da constante de acoplamento γ :

$$\rho \approx \frac{\delta(E - H_K - H_z)}{\Sigma(\gamma)} = \gamma h(\mathbf{q}, \mathbf{p}) z \frac{\partial_E \delta(E - H_K - H_z)}{\Sigma(0)} , \quad (2.23)$$

em que escrevemos $\Sigma = \Sigma(\gamma)$ para explicitar sua dependência com a constante de acoplamento.

Os dois primeiros termos são suficientes, nos casos estudados, para obter a força adiabática até segunda ordem em γ . De fato, aqui surge a necessidade de o acoplamento ser perturbativo, semelhantemente ao tratamento de Caldeira-Leggett, quando se considera a perturbação que cada oscilador do banho sente individualmente. No entanto, cumpre lembrar que este limite não é sequer mencionado no tratamento de Berry-Robbins. Adiante aplicaremos esta expansão para calcularmos

$$\langle h(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \rangle$$

para o potencial NELSON em que a variável dinâmica do acoplamento é $h(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = x$.

2.2.1 O termo de memória e dissipação

Para analisarmos a média do último termo da eq.(2.22), vamos definir a função de autocorrelação da variável dinâmica acoplada:

$$C(\tau) = \langle h_d(t + \tau) h_d(t) \rangle , \quad (2.24)$$

e a susceptibilidade dinâmica retardada, no limite clássico [23]:

$$\chi(t - t') = -\langle [h_d(t), h_d(t')]_c \rangle \theta(t - t') , \quad (2.25)$$

em que $[\cdot, \cdot]_c$ denota o parêntesis de Poisson:

$$[f, g]_c = \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\partial f}{\partial v_{\mathbf{k}}} \frac{\partial g}{\partial u_{\mathbf{k}}} - \frac{\partial f}{\partial u_{\mathbf{k}}} \frac{\partial g}{\partial v_{\mathbf{k}}} \right) . \quad (2.26)$$

Veremos agora que o último da eq.(2.22) pode ser escrito em termos da soma da *transformada de Fourier da função de autocorrelação com a parte imaginária da transformada de Fourier da susceptibilidade dinâmica retardada*.

Usando as expansões²

$$\begin{aligned}h_d(\tau) &= \sum_l u_l (A_l \cos \lambda_l \tau + B_l \sin \lambda_l \tau) + v_l (-A_l \sin \lambda_l \tau + B_l \cos \lambda_l \tau) \\h_d(0) &= \sum_k A_k u_k + B_k v_k ,\end{aligned}$$

obtemos

$$\begin{aligned}C(\tau) &= \langle h_d(\tau) h_d(0) \rangle \\&= \sum_k \left\langle u_k^2 \left(A_k^2 \cos \lambda_k \tau + A_k B_k \sin \lambda_k \tau \right) \right. \\&\quad \left. + v_k^2 \left(B_k^2 \cos \lambda_k \tau - A_k B_k \sin \lambda_k \tau \right) \right\rangle \\&= \sum_k (A_k^2 + B_k^2) \cos \lambda_k \tau .\end{aligned}\tag{2.27}$$

Na segunda igualdade, usamos a ortogonalidade entre v_k e u_k , bem como entre os pares v_i, v_j e u_i, u_j , para $i \neq j$. Na terceira igualdade, usamos a normalização de u_k e v_k .

Por outro lado, $\chi(t)$, para $t > 0$, é dado por

$$\begin{aligned}\chi(t) &= - \langle [h_d(t), h_d(0)]_v \rangle \\&= - \sum_k (-A_k \sin \lambda_k t + B_k \cos \lambda_k t) A_k - (A_k \cos \lambda_k t + B_k \sin \lambda_k t) B_k \\&= \sum_k (A_k^2 + B_k^2) \sin \lambda_k t .\end{aligned}\tag{2.28}$$

Seja a densidade espectral [24]

$$S(\omega) = \int_0^{\infty} \cos \omega \tau C(\tau) d\tau ,\tag{2.29}$$

²Com uma dedução simples, podemos mostrar que basta tomar $t = 0$ na definição de $C(\tau)$, como também $t' = 0$ na definição de χ .

Tomando a transformada de Fourier cosseno da autocorrelação, obtemos

$$\begin{aligned} S(\omega) &= \sum_k (A_k^2 + B_k^2) \int_0^\infty \cos \omega \tau \cos \lambda_k \tau \, d\tau \\ &= \frac{\pi}{2} \sum_k (A_k^2 + B_k^2) (\delta(\omega - \lambda_k) + \delta(\omega + \lambda_k)) \quad . \end{aligned} \quad (2.30)$$

Já a parte imaginária da transformada de Fourier da susceptibilidade é dada por

$$\begin{aligned} \chi''(\omega) &= \sum_k (A_k^2 + B_k^2) \int_0^\infty \sin \omega \tau \sin \lambda_k \tau \, d\tau \\ &= \frac{\pi}{2} \sum_k (A_k^2 + B_k^2) (\delta(\omega - \lambda_k) - \delta(\omega + \lambda_k)) \quad . \end{aligned} \quad (2.31)$$

Isto posto, podemos escrever o último termo da eq.(2.22) como

$$\begin{aligned} &\gamma^2 \sum_k \lambda_k (A_k^2 + B_k^2) \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{\hat{z}(s)}{s^2 + \lambda_k^2} \right) = \\ &\gamma^2 \int_0^\infty \sum_k \delta(\omega - \lambda_k) \omega (A_k^2 + B_k^2) \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{\hat{z}(s)}{s^2 + \omega^2} \right) d\omega = \\ &\frac{\gamma^2}{\pi} \int_0^\infty (S(\omega) + \chi''(\omega)) \int_0^t \sin \omega(t - t') z(t') dt' \end{aligned} \quad (2.32)$$

Este termo encarna o paralelo formal com o tratamento de Caldeira-Leggett para a dissipação. Notamos entretanto que, enquanto lá há uma escolha para a densidade espectral total, aqui ela está definida pela dinâmica caótica do reservatório. $S(\omega)$ é uma função par e $\chi''(\omega)$ é ímpar, como podemos ver das equações (2.30) e (2.31). Todavia, a susceptibilidade $\chi''(\omega)$ é igual à densidade espectral $S(\omega)$ para $\omega > 0$ e, para $\omega < 0$, vale $-S(\omega)$.

O termo de comparação mais ajustado com o formalismo do banho de osciladores é $\chi''(\omega)$, da susceptibilidade generalizada do reservatório, mas como estaremos interessados apenas na parte positiva do espectro, podemos usar como densidade espectral total $2S(\omega)$.

Provamos no próximo capítulo que $S(\omega)$ não se anula para frequências baixas, em qualquer sistema caótico, por causa das órbitas periódicas de

período longo. Esta componente gera um termo de memória. A dependência estritamente linear da função espectral total com ω está intimamente relacionada com a dissipação linear [25].

Apesar de ser uma função ímpar, vemos que X'' é descontínua na origem:

$$X''(\omega) = \begin{cases} S(\omega) & \omega > 0 \\ 0 & \omega = 0 \\ -S(\omega) & \omega < 0 \end{cases} . \quad (2.33)$$

Portanto não podemos aproximá-la por uma função linear próximo à origem, nem no limite adiabático.

Vale insistir que a densidade espectral total que aparece aqui é igual a duas vezes a transformada de Fourier da autocorrelação da variável dinâmica usada para intermediar o acoplamento, ou duas vezes a parte imaginária da transformada de Fourier da susceptibilidade dinâmica retardada do reservatório, para frequências positivas. Insistimos porque esta última é a densidade espectral que aparece no tratamento de Caldeira-Leggett. Por isto podemos dizer que o paralelo formal é exato.

Obtemos por fim que os efeitos médios do acoplamento a um sistema rápido sobre o sistema de interesse são dados pela equação:

$$M_z\langle \ddot{z} \rangle + \lambda\langle z \rangle + 4\beta\langle z^3 \rangle + \left\langle \frac{\partial V_r}{\partial z} \right\rangle = \mathcal{F}(z) , \quad (2.34)$$

em que $\mathcal{F}(z)$ é dado por (2.32). Salientamos que não precisamos nos restringir ao caso em que o sistema rápido é caótico para aplicar a eq.(2.34). Ela é válida sempre que as equações de Hamilton do subsistema caótico tiverem soluções globais para qualquer condição inicial.

Como em geral não se conhece a densidade espectral $S(\omega)$ analiticamente, fazemos uma média microcanônica numérica para obter $C(\tau)$ – veja eq.(2.24) – e, depois de uma aproximar o resultado por uma expressão analítica, calculamos a transformada $S(\omega)$. Já $X''(\omega)$ não pode ser obtida diretamente pelo cálculo numérico. Temos de calcular a transformada de Hilbert, no domínio

do tempo, de $C(\tau)$, e então tomarmos a parte imaginária da transformada de Fourier do resultado, como mostramos a seguir:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\pi}P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{C(t')}{t'-t} dt' &= -\sum_k (A_k^2 + B_k^2) \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\cos \lambda_k t'}{t'-t} dt' \\ &= \sum_k (A_k^2 + B_k^2) \operatorname{sen} \lambda_k t = \chi(t) . \end{aligned} \quad (2.35)$$

Apesar de que não vamos precisar de $\chi''(\omega)$ para analisarmos nossos resultados, tendo em vista a sua igualdade com $S(\omega)$ nas frequências positivas, consideramos importante colocar a sua relação analítica com $S(\omega)$, inclusive para que se tenha um método para averiguar a sua descontinuidade, depois de efetuada a soma em k (veja apêndice C).

2.3 Aplicando ao potencial NELSON

Analisando o termo da média da força flutuante, eq.(2.23), temos que o primeiro termo de

$$\langle x \rangle = \int \rho(x) dx dy dp_x dp_y$$

se anula porque o potencial NELSON é par em x . Já o segundo termo resulta em

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= -\gamma \frac{1}{\Sigma(0)} \int \partial_E \delta(E - H_N - H_z) x^2 z dx dy dp_x dp_y \\ &= -\gamma \frac{1}{\Sigma(0)} 2\partial_\mu \int \delta(E - H_N - H_z) z dx dy dp_x dp_y \\ &= -2\gamma \langle z \rangle \frac{\partial_\mu \Sigma(0)}{\Sigma(0)} \\ &= -\frac{\gamma \langle z \rangle}{\mu} . \end{aligned} \quad (2.36)$$

Usamos, na última igualdade, a expressão de $\Sigma = \partial_E \Omega$:

$$\Sigma(\gamma) = 2\pi^2 \sqrt{\frac{2}{\mu}} \left[E - \beta z^4 - \frac{\lambda z^2}{2} - \frac{p_z^2}{2M} + \frac{\gamma^2 z^2}{2\mu} \right] . \quad (2.37)$$

Logo,

$$-\gamma \langle x_d(t) \rangle = \frac{\gamma^2 \langle z \rangle}{\mu} \quad (2.38)$$

O próximo termo que contribui para a força é proporcional a γ^4 e podemos negligenciá-lo uma vez que o acoplamento é perturbativo.

Quando estamos numa região regular, $S_x(\omega) + \lambda''(\omega)$ tem um grande pico em torno da frequência da órbita periódica horizontal³, digamos ν_x , indo a zero rapidamente fora dali. Como $z(t)$ tem um período muito maior que $2\pi/\nu_x$, a convolução

$$\int_0^t \sin \nu_x(t-t') z(t') dt'$$

é negligenciável. O efeito mais importante do acoplamento neste caso é a força de Born-Oppenheimer, e portanto a aproximação adiabática é satisfatória. Podemos também enxergar na convolução produtos internos entre senos e cossenos com $z(t)$, que serão significativos para o movimento lento se a densidade espectral ou sua derivada não forem muito pequenas para frequências baixas.

Mostramos na figura 2.7 a autocorrelação $C_x(\tau)$ do movimento caótico não-perturbado, calculada numericamente para energia total $E = 0.38$. Ela pode ser muito bem aproximada pela expressão

$$\sigma^2 e^{-\alpha|\tau|} \cos \omega_0 t \quad (2.39)$$

com $\sigma^2 = 1.881$, $\alpha = 4.08 \times 10^{-2}$ e $\omega_0 = 0.1958$. Usando esta expressão, obtemos para $S_x(\omega) + \lambda''(\omega)$ (veja apêndice C)

$$2S_x(\omega) = 2\alpha\sigma^2 \left(\frac{1}{(\omega + \omega_0)^2 + \alpha^2} + \frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + \alpha^2} \right). \quad (2.40)$$

Como já observamos, a densidade espectral obtida a partir de funções de autocorrelação de variáveis dinâmicas em sistemas Hamiltonianos conservativos

³A órbita horizontal é a órbita periódica do potencial NELSON que mais se aproxima de uma oscilação na direção x , como se o NELSON fora um oscilador bidimensional: $V(x, y) = y^2 + \mu x^2/2$.

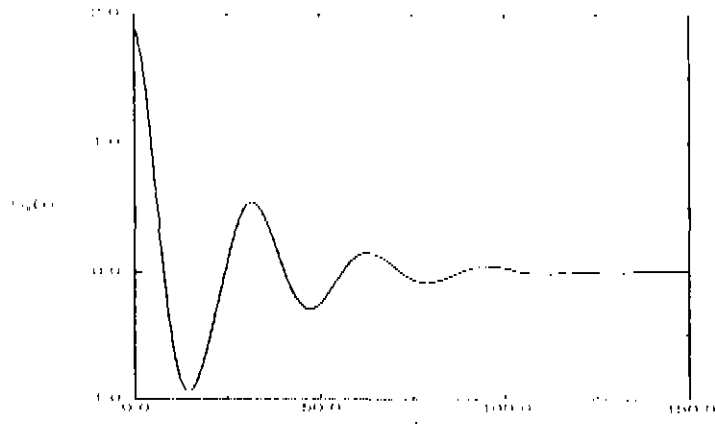


Figura 2.7: A função de autocorrelação como função do tempo. O tempo de correlação é aproximadamente $\frac{2}{\pi\alpha} \approx 15$, corroborando a rapidez do NELSON comparado ao grau z , cujo período de referência é $T = 1176$. Número de pontos no grid: 92928.

é par. Esta propriedade não é mera consequência da definição (2.29), e sim do fato de que $C_L(\tau) = C_L(-\tau)$. Portanto, sua derivada na origem, $\omega = 0$, sempre se anula. Isto se contrapõe a uma tentativa de aproximação linear para $S_L(\omega)$ e também de $\lambda''(\omega)$.

Outra consequência da paridade de $S_L(\omega)$ é o fato de a integral restante na eq.(2.32) não poder ser resolvida em forma fechada. A alternativa é trabalharmos numericamente com a equação (2.31), observando que o termo cúbico em z , presente para β não-nulo, não é originado da derivada de um potencial para o movimento médio. Para que assim o fosse, deveria comparecer como $4\beta\langle z \rangle^3$ e não como $4\beta\langle z^3 \rangle$.

Este termo contém um potencial dependente do tempo para o movimento médio que é a causa das flutuações de $E_{z,r}$. A diferença

$$\Phi(z, t) = 4\beta \left(\langle z^3 \rangle - \langle z \rangle^3 \right)$$

é uma força dependente do tempo. Para $t = 0$, ela se anula, mas seu módulo cresce no tempo. Em [26], temos um exemplo para o caso em que $\beta = 0$, ou seja, este potencial dependente do tempo não comparece. Na figura 2.8, mostramos o comportamento de Φ com respeito ao tempo para as condições

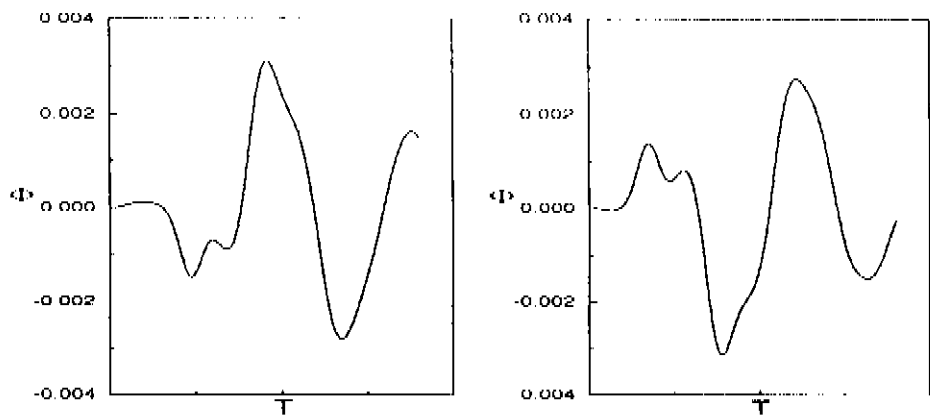


Figura 2.8: A força $\Phi(t, z_0, p_{z_0})$ obtida numericamente. Como na figura 2.4, $T = 1176$ e as condições iniciais são $(z_0, p_{z_0}) = (1.5, 0.5)$ à esquerda e $(z_0, p_{z_0}) = (-1.5, 0.5)$ à direita.

iniciais da figura 2.4. Nos casos estudados, o efeito desta força Φ é muito maior que os do funcional $\mathcal{F}(z)$.

Para estas, calculamos em cada instante de tempo a força acima e substituímos na equação (2.34). O termo $\mathcal{F}(z)$ também pode ser calculado para cada instante de tempo de forma iterativa, mas poderia ter sido desprezado frente a Φ . Assim obtivemos os resultados mostrados na figura 2.9. O acerto do modelo unidimensional assim obtido é espantoso!

Como fica a força Φ para o caso em que o NELSON é regular? Se o tratamento é compreensivo como afirmamos, Φ deve se anular ou ser negligenciável frente à força advinda do potencial adiabático $\frac{\gamma^2 z^2}{2\mu}$. Na figura 2.10 mostramos os gráficos que respondem a esta questão confirmando o sucesso do tratamento. Vale salientar que os principais motivos para Φ não ser relevante nas regiões onde o NELSON é integrável são primeiramente o fato de os impulsos γx serem menores, na proporção da diminuição da energia total, que limita x , e em segundo lugar a periodicidade *rápida* de $x(t)$, pois não há órbitas periódicas de período grande no NELSON regular (veja também apêndice C).

O fato de que $x(t)$, quando o NELSON é regular, ser *mais rápido* pode ser conferido calculando a autocorrelação para esta energia. Devemos ressaltar

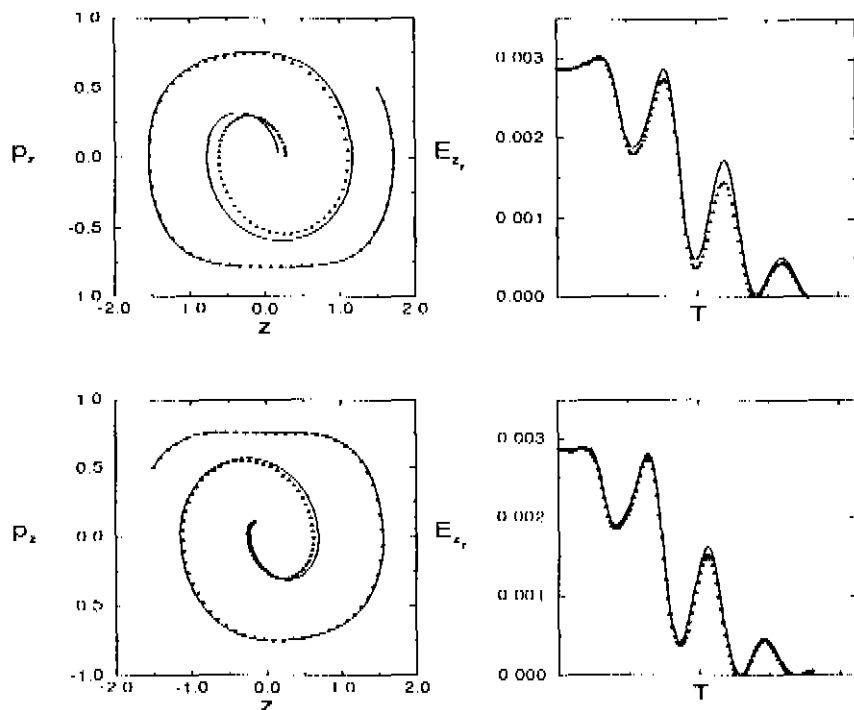


Figura 2.9: À esquerda mostramos superpostos os resultados numéricos para as trajetórias médias segundo a eq.(2.31), linha contínua, e segundo a evolução do ensemble de condições iniciais, com círculos pequeninos. À direita mostramos os gráficos da energia adiabática correspondentes às trajetórias ao seu lado, seguindo a mesma simbologia. Observação: para obtermos a linha pontilhada, selecionamos um quinto dos pontos do conjunto mostrado na figura 2.4. Estes pontos estão igualmente espaçados no tempo.

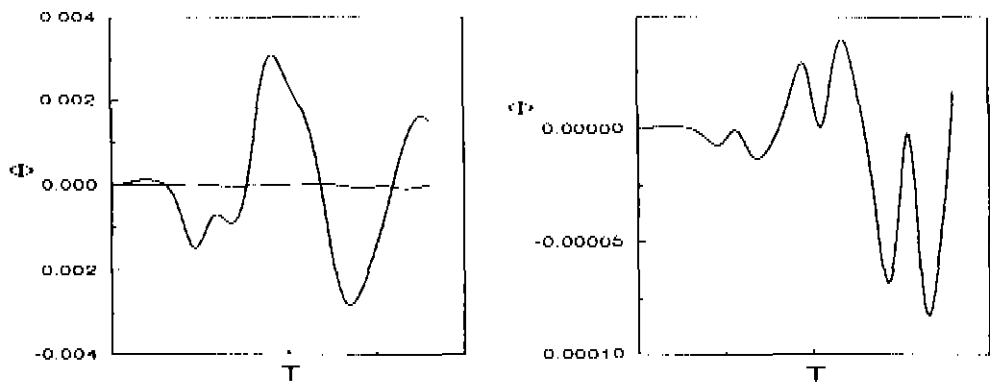


Figura 2.10: Comparação entre as forças Φ para energia total $E = 0.04$ e $E = 0.38$, mesmas condições iniciais, $z_0 = 1.5$ e $p_{z0} = 0.5$. À direita temos a força Φ para $E = 0.04$ sozinha, mostrando com clareza sua amplitude.

que o movimento não é ergódico neste caso. A definição usual de autocorrelação é dada pela média no tempo

$$C_x(\tau) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T x(t)x(t+\tau) dt .$$

No caso ergódico esta média no tempo é igual à média espacial dada pela média microcanônica:

$$C_x(\tau) = \langle x(0)x(\tau) \rangle , \quad (2.41)$$

que é o que de fato aparece para no funcional $\mathcal{F}(z)$, independentemente do regime ser caótico ou regular.

Portanto, também nos casos integrável e regular a ‘autocorrelação’ dada na eq.(2.41) serve à análise, apesar de a equivalência das médias só valer no caso ergódico. A diferença entre a autocorrelação, definida como média no tempo, em relação à função dada em (2.41), no caso integrável, é originada no fato de que qualquer $x(t)$ se restringe a um toro, não podendo visitar toda a superfície de energia. A média microcanônica é sobre toda a superfície de energia.

A figura acima mostra a autocorrelação da variável dinâmica x para o NELSON regular. A diferença marcante em relação ao caso caótico é a presença de uma cauda oscilante e do batimento. Indicam que uma aproximação

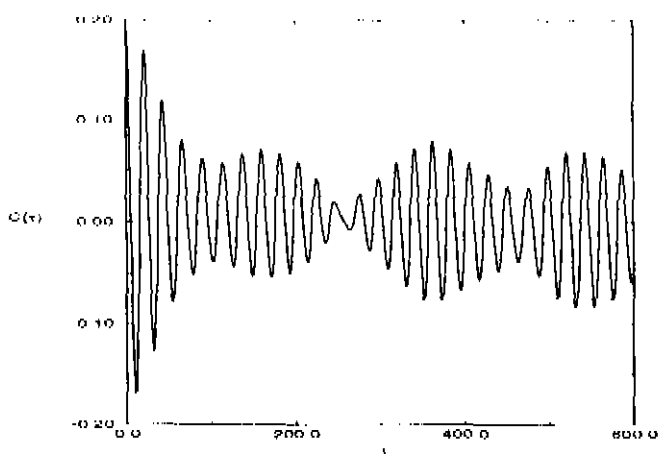


Figura 2.11: Autocorrelação da variável x para o NELSON regular; energia total $E = 0.01$. Número de pontos no grid: 30276.

para $C_x(\tau)$ deve conter um termo tipo $\exp(-\alpha\tau) \cos \omega_1 \tau$ além do decaimento exponencial do caso caótico, veja eq.(2.39). Assim podemos aproximar

$$C_x(\tau) = \sigma^2 e^{-\alpha\tau} \cos \omega_0 \tau + c \sin \omega_1 \tau + d \sin \omega_2 \tau, \quad \tau \geq 0.$$

Como já antecipamos, se ω_1 e ω_2 são muito maiores que a frequência típica do sistema lento, podemos desprezar o efeito da cauda oscilante na eq.(2.34). Os parâmetros que fitam a curva da autocorrelação na região regular, mostrada na figura 2.11, são $\sigma^2 = 0.2244$, $\alpha = 0.0120$, $\omega_0 = 0.2890$, $c = 0.0485$, $d = -0.0264$, $\omega_1 = 0.2815$ e $\omega_2 = 0.3080$. Ocorre que todas as frequências são muito grandes, não havendo motivo para preferir os termos em seno em favor da exponencial decrescente.

Ainda assim, as curvas $(\langle z \rangle, \langle p_z \rangle)$ e $E_{z,r} \times t$ mostram novamente que temos um bom acordo entre a equação dissipativa e a média microcanônica, mesmo desprezando os termos senoidais.

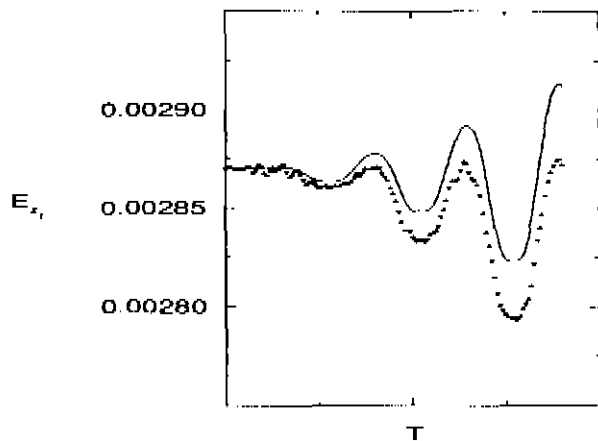
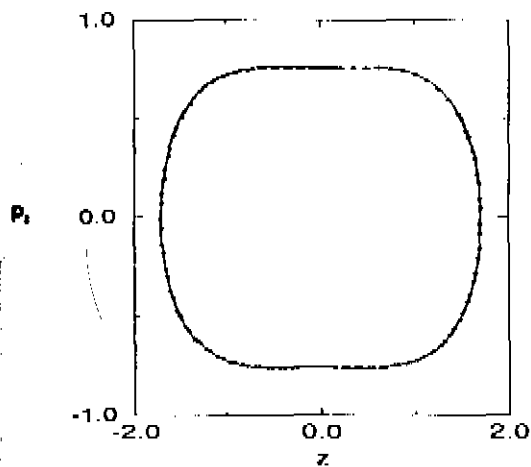


Figura 2.12: Análogo à figura 2.9. A energia total $E = 0.01$ coloca o NELSON num regime regular.

2.4 A aproximação Markoffiana

Esta é uma breve seção que fornece fundamentos para uma aproximação Markoffiana para a equação (2.34) se o sistema de interesse é lento. Na verdade, mostramos que podemos negligenciar apenas parte dos efeitos de memória na eq.(2.34). No que se chama *aproximação Markoffiana*, não há *efeitos de memória*⁴.

O termo que envolve a densidade espectral do sistema caótico é dado por, veja eq.(2.32),

$$\mathcal{F}(z) = \frac{2\gamma^2}{\pi} \int_0^\infty S(\omega) \int_0^t \sin \omega(t-t') z(t') dt' d\omega \quad (2.42)$$

para o potencial NELSON. Esta análise pode ser facilmente estendida para o acoplamento com um sistema caótico qualquer.

O objetivo é simplificar a integral em ω evitando que ela seja calculada numericamente. Para isto, teremos de introduzir um parâmetro η , que será o análogo à constante dissipativa fenomenológica no modelo do banho de osciladores.

Antes de tudo, supomos que o grau z é de fato lento comparado ao sistema caótico. Uma vez que a hipótese adiabática é satisfeita, podemos imaginar que a integral em ω vá até um limite finito, digamos Ω , acima do qual os

⁴De fato, Stratonovich [24] define um processo Markoffiano como um processo sem “efeito retardado”, *aftereffect*. Em símbolos, sendo $\xi(t)$ um processo estocástico, e $\xi(t_1), \dots, \xi(t_n)$ um conjunto de valores em instantes consecutivos $t_1 > t_2 > \dots > t_n$, então a probabilidade condicional

$$w[\xi(t_1)|\xi(t_2), \dots, \xi(t_n)] = \frac{w[\xi(t_1), \dots, \xi(t_n)]}{w[\xi(t_2), \dots, \xi(t_n)]}$$

não depende de $\xi(t_1)$, para $i > 2$, ou seja

$$w[\xi(t_1)|\xi(t_2), \dots, \xi(t_n)] = p(\xi(t_1), \xi(t_2)), n > 2.$$

Para um processo em que a variável tempo é contínua, isto equivale a um processo sem memória.

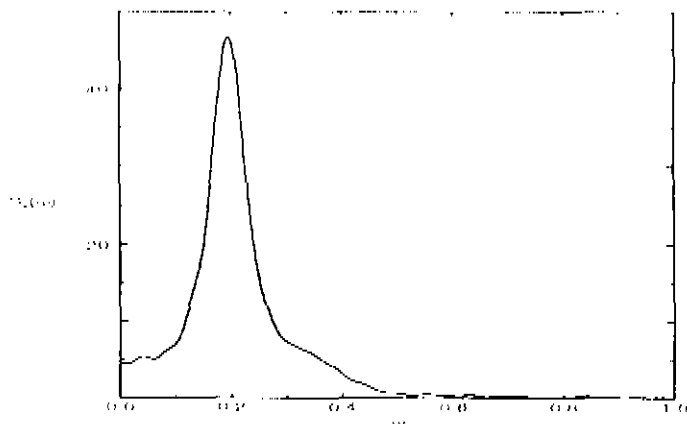


Figura 2.13: A densidade espectral, transformada de Fourier da função de autocorrelação dada na figura 2.7. O máximo ocorre em $\omega = 0.195$.

efeitos sobre a dinâmica de z são desprezíveis. Repare que isto tem fundamento na medida em que comparece em $\mathcal{F}(z)$ a convolução de $z(t')$ com uma função seno, que oscila muito rapidamente para $\omega \gtrsim \Omega$.

Escrevendo a expansão de $S(\omega)$ em torno da origem, temos

$$S(\omega) = S(0) + \omega \frac{dS(\omega)}{d\omega} + \dots$$

Aliada à expansão acima, vamos fazer uma aproximação para a S , esquematizada na figura 2.14.

O primeiro termo da expansão gera um efeito de memória na dinâmica do sistema lento:

$$\frac{2\gamma^2 S(0)}{\pi} \int_0^t \frac{1 - \cos \Omega(t-t')}{t-t'} z(t') dt' \quad (2.43)$$

em que o termo $\frac{\cos \Omega(t-t')}{t-t'} z(t')$ pode ser desprezado com base na aproximação adiabática longe de $t - t' \gtrsim 0$, veja figura 2.14.

O que chamamos de aproximação Markoffiana aqui é, na verdade, considerar que todo o efeito de memória seja proporcional a $S(0)$. Observando um gráfico típico da densidade espectral, dado pelo potencial NELSON a energia $E = 0.38$ (veja figura 2.13), podemos aproximá-lo por três retas. Tomando então $\frac{dS(\omega)}{d\omega}$ como uma função descontínua e constante por pedaços, temos

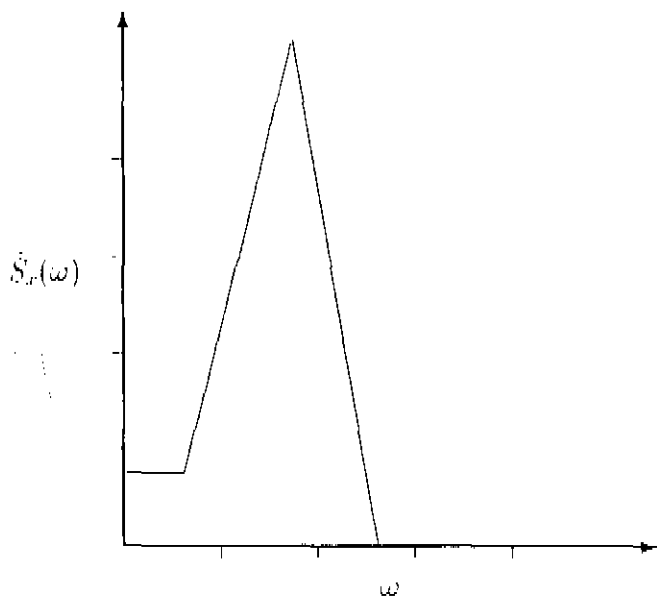


Figura 2.14: Uma aproximação para a densidade espectral. As descontinuidades da derivada ocorrem em $\omega = \epsilon$, $\omega = \omega_1$ e $\omega = \omega_2 = \Omega$, nesta ordem. η_1 é a inclinação do segmento em $\hat{S}$ é crescente, enquanto η_2 é a inclinação do segmento decrescente.

(veja figura 2.11)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{dS(\omega)}{d\omega} \right] \omega \sin \omega(t-t') d\omega \approx -\eta_1 \frac{d}{dt} \frac{\sin \omega_1(t-t')}{t-t'} - \eta_2 \frac{d}{dt} \frac{\sin \omega_2(t-t') + \sin \omega_1(t-t')}{t-t'} \quad (2.44)$$

Se ω_2 e ω_1 são muito maiores que as frequências típicas do sistema lento, podemos desprezar o efeito do segundo termo, restando apenas

$$-\eta_1 \pi \delta(t-t') \; ,$$

pois a aproximação adiabática $\omega_1 \rightarrow \infty$ já foi assumida.

Para testes numéricos, η_1 está limitado ao maior valor positivo que a derivada de $S(\omega)$ assume. Em resumo, o efeito do funcional $\mathcal{F}$ pode ser escrito como

$$\frac{2\gamma^2 S(0)}{\pi} \int_0^{t-\epsilon} \frac{z(t')}{t-t'} dt' = 2\gamma^2 \eta_1 \dot{z}(t) \; , \quad (2.45)$$

em que ϵ é um parâmetro para evitar que a integral no tempo divirja.

Nesta aproximação, chegamos o mais próximo possível da equação de Langevin para o sistema lento, uma vez que $S(0) \neq 0$ implica na existência de um termo de memória.

2.5 Estudo da equação dissipativa – reservatórios de bilhares

A equação unidimensional

$$M_z \langle \ddot{z} \rangle + \lambda \langle z \rangle + 4\beta \langle z^3 \rangle + \left\langle \frac{\partial V_r}{\partial z} \right\rangle = \mathcal{F}(z) \; ,$$

contém toda a informação, até terceira ordem na constante de acoplamento, sobre o movimento do subsistema lento. Nesta seção, procuramos manipular o efeito sobre o sistema lento do acoplamento com o sistema caótico.

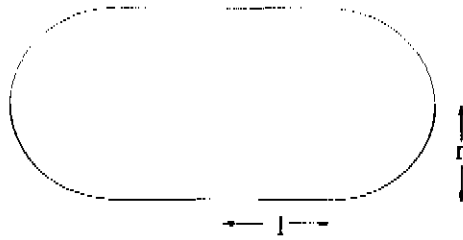


Figura 2.15: Estádio ou bilhar de Bunimovich. As dimensões usadas nos programas foram $r = 1$, $l = 43.85$ para o bilhar 1; $r = 3$, $l = 12.52$ para o bilhar 3; $r = 5$, $l = 5$ para o bilhar 5 e $r = 7$, $l = 0.88$ para o bilhar 7. r e l foram escolhidos de modo a manter a área do bilhar praticamente a mesma nos quatro casos.

Por um lado, fazer o mesmo tipo de problema substituindo o NELSON por um bilhar caótico, como o estádio, seria um segundo teste para a teoria. Por outro, imaginamos ser interessante uma comparação dos efeitos de acoplar sistemas caóticos em que pudéssemos variar o seu tempo de correlação, que é o que mais importa no termo do lado direito da eq.(2.34).

Isto pode ser feito com razoável simplicidade usando o estádio, também chamado bilhar de Bunimovich (veja figura 2.15), como sistema caótico (R) no arranjo geral

$$S \hat{+} R .$$

Fizemos quatro tipos de bilhares distintos, a partir de um estádio com as seguintes dimensões: semicírculos de raio $r = 5$ e quadrado de lado $l = 5$, veja figura. O invariante adiabático ergódico no caso de bilhares é a sua área. Mantivemos a área constante variando o raio r e correspondentemente o lado l do retângulo.

Os tamanhos l e r estão relacionados pela fórmula da área do bilhar, que foi mantida praticamente constante:

$$A = 4rl + \pi r^2 \approx 178 \quad (2.46)$$

Bilhares diferentes têm efeitos substancialmente diferentes sobre o subsis-

tema lento (potencial quártico), uma vez que o funcional $\mathcal{F}$ é suficientemente diferente para cada bilhar. Estes efeitos acompanham a mudança nas autocorrelações da variável acoplada, que no caso tomamos como a combinação

$$ax + by \tag{2.47}$$

com $a/b = 2/5$. Evitamos usar x , como no caso do potencial NELSON, por ser um eixo de simetria do bilhar. Pior ainda seria usar y , por que contém uma família de órbitas marginal, de estabilidade 0.

Portanto, tomaremos a Hamiltoniana total

$$H = H_c + H_i + H_z \ ,$$

com H_z como no acoplamento com o NELSON e

$$\begin{aligned} H_c &= \frac{p_x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2} + V_B(x, y) \\ H_i &= (ax + by)z \end{aligned}$$

em que $\mathcal{B}$ denota a região do bilhar e V_B se anula dentro bilhar sendo infinito do seu lado de fora.

A densidade espectral que aparece em $\mathcal{F}(z)$ nos casos considerados acima é dada por

$$S(\omega) + \chi''(\omega) = 2 \int_0^\infty \cos \omega \tau \langle (ax + by)(ax(\tau) + by(\tau)) \rangle d\tau \ , \tag{2.48}$$

em que $\langle \cdot \rangle$ denota a média no ensemble microcanônico e o fator 2 foi incluído por conta da igualdade $S(\omega) = \chi''(\omega)$.

O que fazemos numericamente é o cálculo da autocorrelação pela evolução desacoplada. As autocorrelações, $C_i(\tau)$, em que i denota o número do bilhar, são dadas por

$$C_i(t) = \langle (ax + by)(ax(t) + by(t)) \rangle \tag{2.49}$$

Como usamos sempre a proporção $a/b = 2/5$, $C_i(t)$ assume a forma

$$C_i(t) = a^2 \langle (2x + 5y)(2x(\tau) + 5y(\tau)) \rangle \ .$$

Variamos a em cada bilhar de modo que a autocorrelação $C_i(0)$ seja praticamente constante. Tem isto o efeito desejado de manter perturbativo o acoplamento, pois a força vista pelo sistema lento é $a(2x + 5y)$, e o módulo máximo de $2x + 5y$ varia fortemente do bilhar de raio $r = 1$ para os outros (veja figura 2.15).

O termo de Born Oppenheimer se anula para este acoplamento, como podemos ver pelo cálculo do invariante adiabático Ω :

$$\Omega = \int \Theta(E - H_c - H_i - H_z) \, dx \, dy \, dp_x \, dp_y$$

Fazemos a mudança de variáveis

$$\begin{aligned} p_x &= \sqrt{2r} \cos \theta \\ p_y &= \sqrt{2r} \sin \theta \, . \end{aligned}$$

Trabalhamos com $E \geq H_i + H_z$, para qualquer $x, y \in \mathcal{B}$. Esta hipótese não é muito restritiva porque vai de encontro com o fato de H_i ser perturbativo e que $E_z \ll E$.

Temos portanto

$$\begin{aligned} \Omega &= 2\pi \int_0^{(E-H_i-H_z)} \int_{\mathcal{B}} dr \, dx \\ &= 2\pi A(E - H_z) - 2\pi z \int_{\mathcal{B}} (ax + by) \, dx \, dy \, , \end{aligned}$$

mas como o segundo termo se anula devido à simetria do bilhar, temos

$$\Omega = 2\pi A(E - H_z) \tag{2.50}$$

Da invariância adiabática de Ω decorre que

$$H_z \approx \text{constante}$$

sem nenhum potencial adiabático.

2.5.1 Resultados numéricos

Tivemos algumas dificuldades para a integração das equações de Hamilton para o bilhar, que vamos mencionar brevemente. Devido ao fato de o bilhar sofrer a força do sistema lento, as trajetórias no plano $x - y$ não são retas.

Apesar de a curvatura ser pequena, pois estamos com um problema perturbativo, a previsão de choque com as paredes do bilhar fica muito prejudicada. Principalmente em torno das intersecções das semicircunferências com os segmentos de reta, onde temos de definir entre dois tipos de reflexão, trocando o sinal do momento na direção y ou na direção da normal às semicircunferências.

O algoritmo teve de separar dois casos de provável choque: aquele em que o ponto chegava próximo à parede com velocidade normal razoável e o segundo, em que o ponto chegava próximo à parede com velocidade normal baixa, módulo menor que $< 2c - 3$, quando poderia ocorrer uma tangência.

Passamos à análise dos resultados numéricos.

Como não há potencial adiabático, o período de referência do quártico sofre uma diminuição nos resultados desta seção, apesar de estarmos sempre com a mesma condição inicial no plano de fase do sistema lento. O período T , no acoplamento com o NELSON, vale 1176, e aqui $T = 1096$. A energia E_z , inicial também muda de 2.87×10^{-3} para 3.275×10^{-3} .

O número de condições iniciais varia de um bilhar para outro, segundo o critério intuído da caoticidade. Na verdade, todos estes bilhares são caóticos, mas o expoente de Lyapounov médio é maior para o bilhar 5. Podemos também encarar o bilhar 1 como quase retangular, que é um bilhar integrável. No outro extremo está o bilhar 7, que é quase circular.

A maneira como fazemos o grid de pontos para os bilhares é diferente daquela com que parametrizamos a superfície de energia do NELSON. Espalhamos os pontos uniformemente sobre a região do bilhar, no espaço de configuração, e usamos um ângulo para p_x e p_y . Os pontos da borda do bilhar que tivessem momento apontando para fora eram cortados. Como

consequência do parágrafo anterior, fizemos a densidade de pontos nos bilhares 3 e 5 maior que nos outros, intuindo os números de acordo com a suavidade das trajetórias médias.

Esta gradação na caoticidade dos bilhares se reflete nos gráficos das autocorrelações: a razão pela qual aquelas para os bilhares 3 e 5 são menos suaves é a maior caoticidade deles.

Como já mencionamos, conforme o bilhar, variamos as constantes a e b de modo a manter perturbativo o acoplamento. Usamos os seguintes valores:

$$\begin{aligned}
 \text{Bilhar 1 : } & a = 4 \times 10^{-4} & b = 1 \times 10^{-3} \\
 \text{Bilhar 3 : } & a = 1.0752 \times 10^{-3} & b = 2.688 \times 10^{-3} \\
 \text{Bilhar 5 : } & a = 1.1992 \times 10^{-3} & b = 2.998 \times 10^{-3} \\
 \text{Bilhar 7 : } & a = 1.0544 \times 10^{-3} & b = 2.636 \times 10^{-3}
 \end{aligned} \tag{2.51}$$

Nas próximas quatro páginas, mostramos os gráficos das autocorrelações de $ax + by$ para cada bilhar. Os gráficos do movimento médio do grau lento sob o efeito do acoplamento com o bilhar, comparado ao obtido através da eq.(2.34), são também mostrados. Nestes últimos gráficos, adotamos a mesma simbologia da seção 2.3: a linha contínua representa a trajetória obtida via eq.(2.34) e a pontilhada representa a trajetória obtida via média microcanônica.

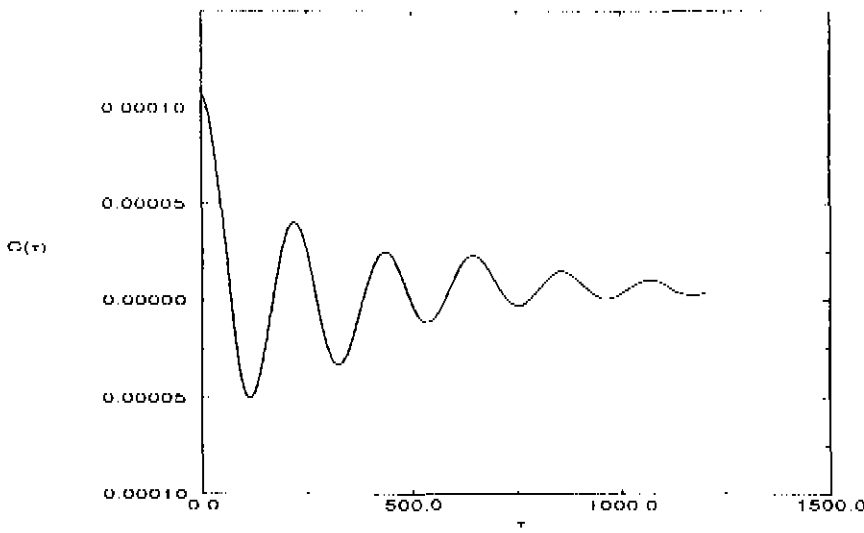


Figura 2.16: Correlação para o bilhar 1. Número de condições iniciais: 16828.

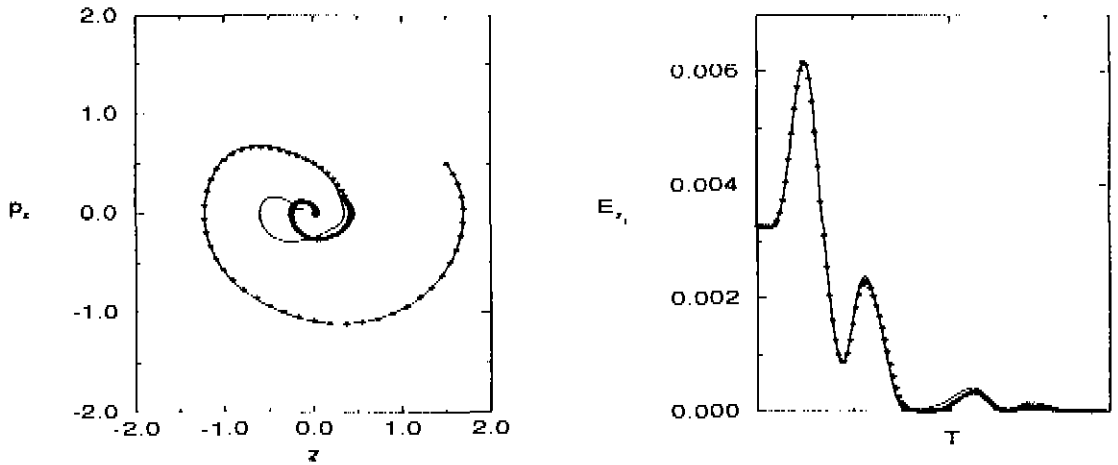


Figura 2.17: (a) A projeção do movimento médio no plano de fase das coordenadas do sistema lento. (b) $E_{z,r}$ calculada em cada ponto da trajetória de (a) em função do tempo. $T = 1096$ para $\beta = 4 \times 10^{-4}$, $z_0 = 1.5$ e $p_{z0} = 0.5$. Na abscissa, T denota um período. Acoplamento com o bilhar 1. A linha contínua representa a trajetória obtida via eq.(2.34) e a pontilhada representa a trajetória obtida via média microcanônica.

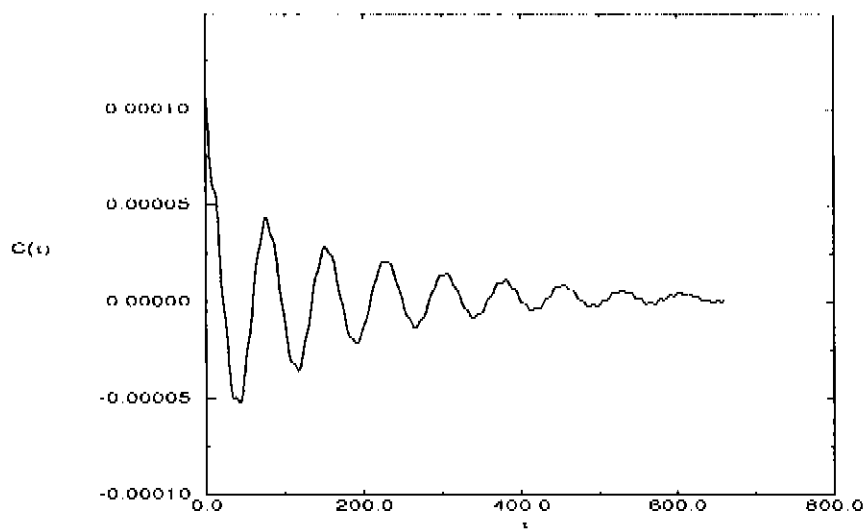


Figura 2.18: Correlação para o bilhar 3. Número de condições iniciais: 49682.

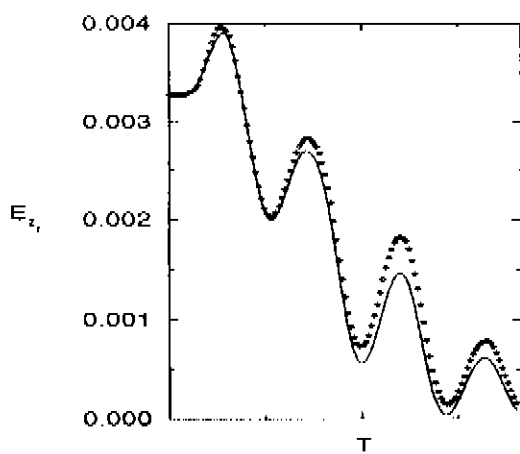
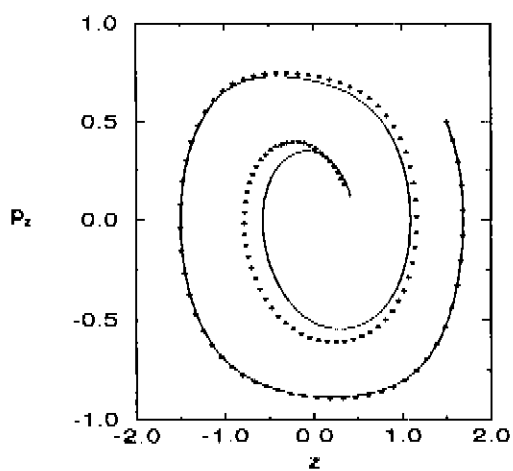


Figura 2.19: Análogo à figura (2.17). Acoplamento com o bilhar 3.

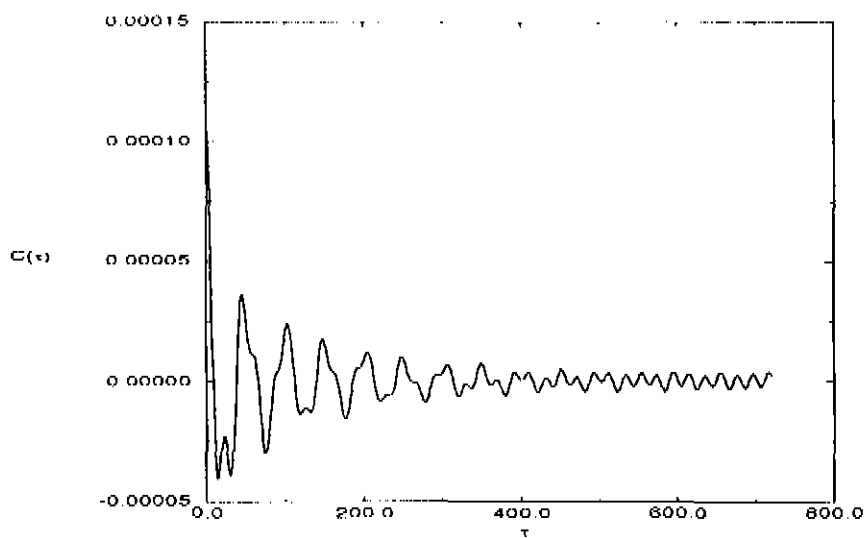


Figura 2.20: Correlação para o bilhar 5. Número de condições iniciais: 27268.
Obs: ficará pronto com 48046 condições iniciais.

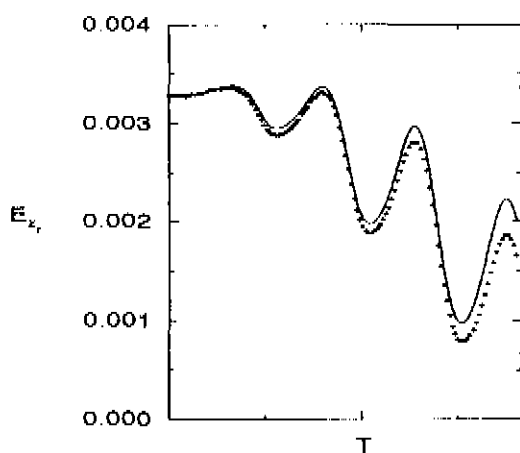
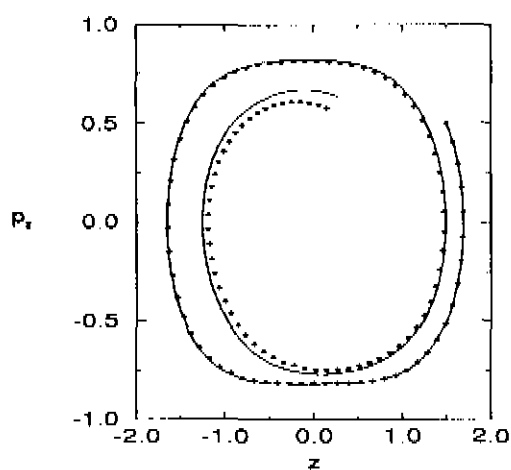


Figura 2.21: Análogo à figura (2.17). Acoplamento com o bilhar 5.

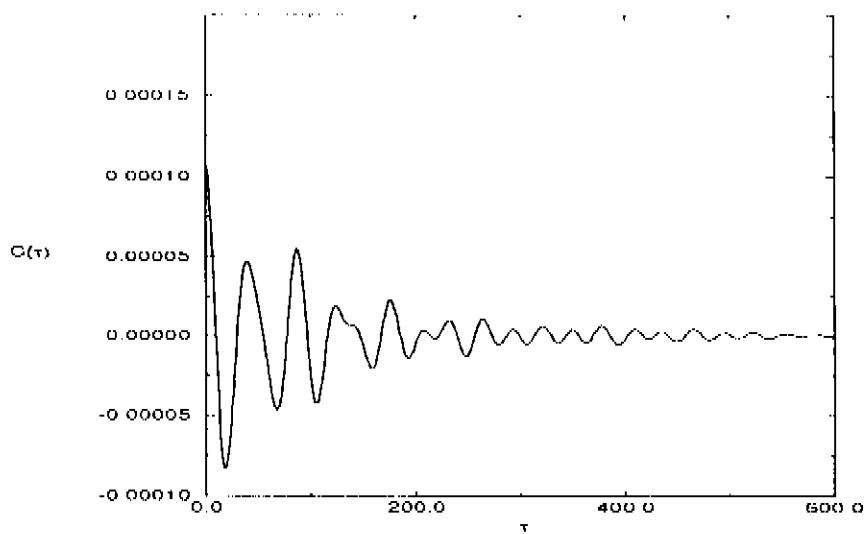


Figura 2.22: Correlação para o bilhar 7. Número de condições iniciais: 17459.

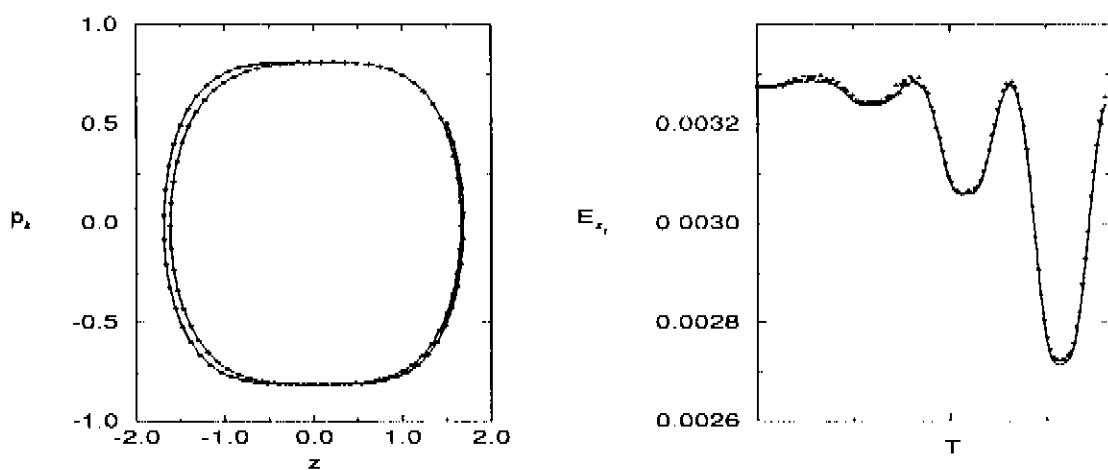


Figura 2.23: Análogo à figura (2.17). Acoplamento com o bilhar 7.

Obtemos um comportamento semelhante em todos os casos. O decaimento exponencial comparece com maior ou menor intensidade. É possível que ele esteja relacionado com o expoente de Lyapounov médio do bilhar.

Em comparação com o NELSON caótico, temos a presença de uma cauda oscilatória nas autocorrelações mesmo no caso do bilhar 5, que assinala uma diferença marcante. Mas não temos batimentos como no caso do NELSON regular. Isto indica que a expressão mais adequada para a autocorrelação é

$$\propto e^{-\beta t} \cos \omega_0 t + c \sin \omega_1 t. \quad (2.52)$$

Esta cauda oscilante tem origem na família de órbitas verticais. É interessante verificarmos esta afirmação numericamente para fazermos uma conexão com a eq.(3.59) do próximo capítulo ou eq.(39) de [27].

Calculando as transformadas de Fourier cosseno de cada uma das autocorrelações, verificamos que as frequências estão relacionadas com os períodos de certas órbitas periódicas, como a vertical e a losangular (que tem vértices em $(\pm x_{\max}, 0)$ e $(0, \pm y_{\max})$). Mostramos nos gráficos correspondentes como esta relação se dá. Ressaltamos que a órbita vertical não aparece na autocorrelação do bilhar 1, o mais comprido, e quase não se vê no bilhar 3, porque a amplitude da autocorrelação da variável y é proporcionalmente muito menor nestes casos. É por isto que não vemos nas transformadas para os bilhares 3 e 5 alguma frequência mais próxima daquela da órbita vertical.

Não fizemos uso de uma aproximação da autocorrelação pela fórmula (2.52) nos cálculos via equação dissipativa (2.34), isto é, para a obtenção dos dados em cada par de gráficos $z = p_z$ e $E_{z\tau} \times t$. Entretanto, como já afirmamos anteriormente, na seção 2.3 e em [26], quando analisávamos o caso do acoplamento ao NELSON integrável, um comportamento oscilatório puro na autocorrelação pode simplesmente não ter efeito no movimento médio $(\langle z \rangle, \langle p_z \rangle)$. Se a frequência de oscilação ω_1 é grande, significa que enquanto $\langle z \rangle$ variou de ordem 1, $\sin \omega t$ terá oscilado muitas vezes.

Este aspecto é muito interessante de se comparar entre os bilhares 3 (e/ou 5) e o bilhar 1. Note que o bilhar 1 é muito mais lento que os outros. Na

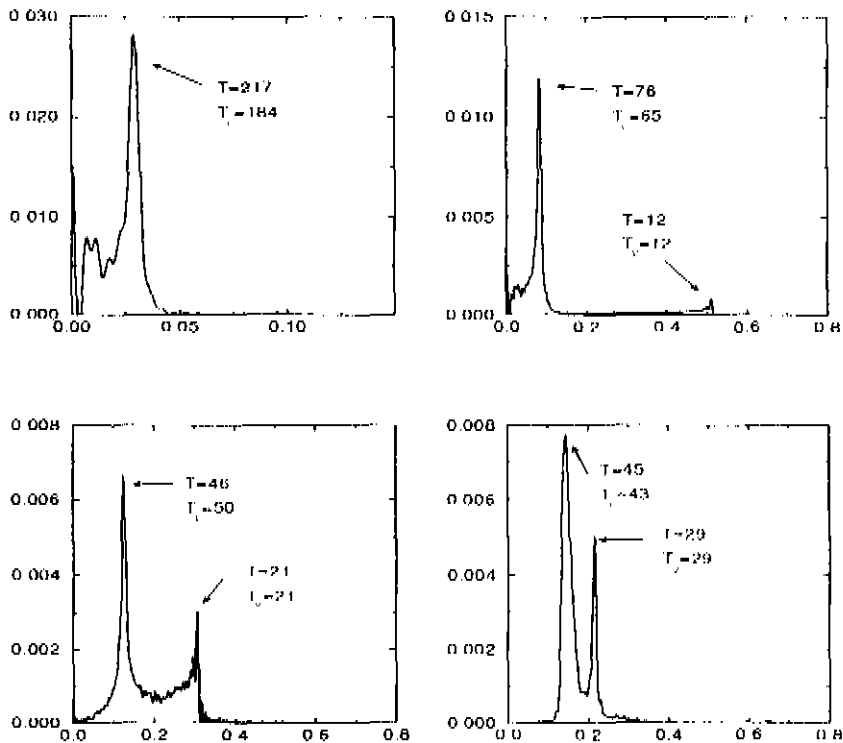


Figura 2.24: As transformadas de Fourier cosseno calculadas numericamente a partir dos dados dos gráficos das correlações. A abscissa é a frequência e a ordenada é $S_i(\omega)$. Acima à esquerda, bilhar 1; acima à direita, bilhar 3; abaixo à esquerda, bilhar 5; abaixo à direita, bilhar 7. $T = 2\pi/\omega_{\max}$, em que $\omega_{\max}$ é a frequência onde ocorre o pico de $S_i(\omega)$. T_L denota o período da órbita losangular e T_V o período da órbita vertical.

verdade, não constatamos a *necessidade* da hipótese adiabática, isto é, o subsistema caótico ser rápido, para obtermos um comportamento dissipativo para $(\langle z \rangle, \langle p_z \rangle)$, tendo em vista os dados obtidos com o bilhar 1. Basta comparar a frequência de pico da densidade espectral do bilhar $\omega = 0.029$ com o período do quártico $T = 1096$, que dá uma frequência 5.7×10^{-3} . São valores já muito próximos.

Isto nos sugere um último teste numérico, mas de bastante importância. Diminuído a energia total, as autocorrelações são esticadas no tempo. Os bilhares ficam ainda mais lentos, na proporção da raiz da razão de energias. A nova energia é escolhida para que o bilhar 5 tenha seu período principal aproximadamente igual ao do subsistema de interesse. Neste também aumentamos a constante β para diminuir seu período. Para que tudo possa ser feito sem afetar (muito) a condição de perturbação, precisamos mudar também a condição inicial para $z_0 = 0.0$ e $p_{z0} = 0.5$, além de mudar a massa M_z de 100 para 10.

Em resumo, a energia total é tomada como $E = 1.92 \times 10^{-2}$, $1/25$ da energia anterior 0.48; $\beta = 0.1024$, 256 vezes o β anterior. Com estes dados, o período de referência do quártico é $T = 247$ e o pico da densidade espectral do bilhar 5 é levado para o equivalente a um período $T_b = 250$. As constantes de acoplamento também foram diminuídas para mantermos a condição de perturbação: $a = 2.4 \times 10^{-4}$ e $b = 6.0 \times 10^{-4}$.

A figura 2.25 mostra que o efeito de decréscimo da energia média do sistema de interesse permanece.

2.6 Conclusões parciais

Neste capítulo, estudamos o acoplamento de um sistema de interesse a um reservatório caótico. Obtivemos que o efeito médio deste acoplamento é

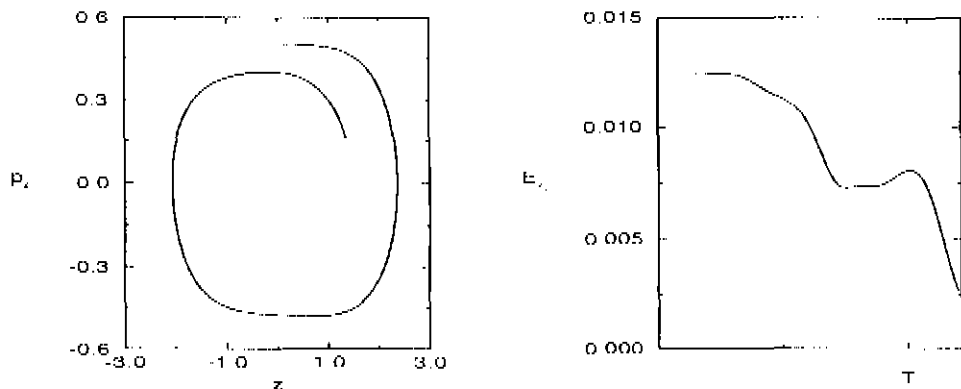


Figura 2.25: À esquerda, a projeção do movimento médio no plano de fase das coordenadas do sistema de interesse para energia total $E = 0.0192$, com condição inicial $(z_0, p_{z0}) = (0.0, 0.5)$. À direita, a energia do sistema de interesse E_{z_T} como função do tempo. O número de pontos no grid é 27268. Outras constantes foram significativamente alteradas apenas para este gráfico: $M_z = 10$, $\beta = 0.1024$, $a = 2.4 \times 10^{-4}$ e $b = 6.0 \times 10^{-4}$. Com estes parâmetros, os períodos desacoplados são muito próximos $T = 247$ e $T_b = 250$, em que $T_b = 2\pi/\omega_b$ e ω_b é a frequência de pico (prevista) da densidade espectral do bilhar 5. O tempo de propagação é $1.2T$.

dado na equação (2.34)

$$M_z \langle \ddot{z} \rangle + \left\langle \frac{\partial V}{\partial z} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial V_r}{\partial z} \right\rangle = \mathcal{F}(z) ,$$

em que z é a variável do sistema de interesse, suposto unidimensional, e $V(z) = \lambda z^2 + \beta z^4$ é o potencial quártico. Sendo γ uma constante de acoplamento, a eq.(2.34) contém toda a informação sobre os efeitos do acoplamento na média do movimento do sistema de interesse até terceira ordem em γ .

Vimos que a não-linearidade do sistema lento cria um potencial dependente do tempo. Este potencial surge da diferença entre as médias $\langle z^3 \rangle$ e $\langle z \rangle^3$, no caso do potencial quártico estudado, e promove grandes oscilações na energia média do sistema lento. Esta energia, com ou sem efeito adiabático de ordem zero (termo de Born-Oppenheimer) de acordo com o sistema caótico a que acoplamos, apresenta também um decréscimo irreversível, que é devido ao mesmo potencial Φ nos casos aqui mostrados. Quando o sistema lento é linear, o termo responsável pela dissipação está no funcional $\mathcal{F}$ na eq.(2.34).

O funcional $\mathcal{F}$, veja eq.(2.32), traz a informação sobre o sistema caótico, sua densidade espectral $S(\omega)$. Na verdade, apenas a densidade espectral da variável a que acoplamos o sistema lento é que conta. Podemos aproximar $S(\omega)$ por funções lineares por partes, buscando tornar (2.34) mais parecida com a equação de Langevin, que não contempla efeitos de memória. A propriedade dos sistemas caóticos conservativos de terem órbitas periódicas com período tão grande quanto se queira faz com que $S(\omega)$ seja não nula para $\omega \neq 0$. Isto contrasta com o tratamento de Caldeira e Leggett, que usam uma aproximação linear para a densidade espectral do reservatório. Esta diferença faz com que, no acoplamento ao reservatório caótico, não se possa desprezar de todo os efeitos de memória, mas sua amplitude é proporcional a $S(0)$.

Para resolvermos o problema do acoplamento, lançamos mão de uma teoria de espaços de Hilbert em Mecânica Clássica. Esta teoria será melhor detalhada nos capítulos a seguir. Destacamos, como motivação adicional

da teoria, o esclarecimento da relação entre as propriedades da densidade espectral, como os seus máximos, com as frequências das órbitas periódicas *mais importantes* do sistema caótico.

Capítulo 3

Formulação Heurística dos espaços de Hilbert

Neste capítulo, mostramos como a idéia da introdução da medida de Dirac no espaço de fases surgiu. Parte de uma analogia com o princípio da uniformidade [5] toda a abstração que redundou na formalização da medida no espaço de Hilbert de variáveis dinâmicas.

3.1 O operador de Liouville

Consideramos um sistema Hamiltoniano autônomo com

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q) , \tag{3.1}$$

em que $V(q)$ tende ao infinito quando $|q| \rightarrow \infty$ e tem um limitante inferior. Isto garante que as soluções das equações de Hamilton são limitadas no espaço de fases. Pelo teorema 12.5 de [22], a existência de um mínimo global implica que o potencial $V(q)$ é **completo**, isto é, que as soluções das equações de Hamilton, para qualquer condição inicial, podem ser estendidas ao infinito no tempo.

O primeiro passo para introduzir a noção de espaço de Hilbert em mecânica clássica é movermos nossa atenção para as funções definidas no espaço de fases a valores complexos, as *variáveis dinâmicas*, em vez de só considerarmos as trajetórias do fluxo Hamiltoniano

$$\begin{aligned} f &: \mathbf{R}^{2N} \rightarrow \mathbf{C} \\ (q, p) &\rightarrow f(q, p) . \end{aligned}$$

Podemos dotar este espaço de funções de um produto interno, por exemplo definindo

$$\langle f, g \rangle = \frac{1}{\Sigma} \int \delta(E - H) f(q, p) g(q, p) \, dq \, dp , \quad (3.2)$$

em que estamos supondo que a integral do lado direito converge e o fator de normalização Σ é dado por $\int \delta(E - H) \, dq \, dp$. Esta definição é bastante conveniente para o caso em que a superfície de energia é limitada e fechada¹, portanto compacta, no espaço de fases. Outras definições são possíveis, mas esta é a mais simples considerando que a evolução de uma variável dinâmica qualquer obedece implicitamente a conservação de energia, isto é, q e p em $f(q, p)$ obedece às equações de Hamilton. Por outro lado, adiantamos que esta definição terá de ser modificada mais tarde. Ela serve como ponto de partida da discussão da medida e do produto interno adequados para o espaço de Hilbert que pretendemos construir.

De fato, podemos tratar apenas de funções de suporte compacto², C_0^∞ , pois como as superfícies de energia $E = H$ são compactas, não há perda de generalidade. A evolução temporal das variáveis dinâmicas é dada pela relação abaixo, que define o operador U_t ,

$$U_t(f(q, p)) = f(q(t), p(t)) ,$$

¹Note que a superfície de energia e o domínio dentro dela, incluindo a próprio, são sempre fechados, porque são definidos a partir de uma equação, no caso da superfície, ou inequação, no caso do domínio

²O suporte de uma função é o fecho do subconjunto do domínio onde ela não se anula.

em que $(q(t), p(t))$ é o ponto da única trajetória que tem (q, p) como condição inicial.

Uma forma equivalente de se obter a evolução de uma variável dinâmica é dada pela equação diferencial

$$\frac{df}{dt} = \mathcal{L}f, \quad (3.3)$$

em que $\mathcal{L}$ é o operador de Liouville definido pelo parêntesis de Poisson:

$$\mathcal{L}f = [f, H] = \sum_i \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i}.$$

Uma condição suficiente para que $\mathcal{L}$ seja um gerador de *um grupo unitário a um parâmetro* é que as equações de Hamilton tenham soluções globais, isto é, que o potencial $V(q)$ seja completo. Por outro lado, qualquer potencial que permite que uma partícula viaje uma distância infinita num tempo finito faz com que as equações de Hamilton *não* tenham soluções globais. A afirmação de que U_t é unitário, o teorema de Liouville, é dada pelo seguinte

Teorema: *Se as equações de Hamilton têm soluções globais, então $-i\mathcal{L}$ é um operador essencialmente auto-adjunto.*

Um operador *essencialmente* auto-adjunto possui uma única extensão auto-adjunta.

Como veremos a seguir, para que trabalhem com as autofunções não triviais de $-i\mathcal{L}$, isto é, diferentes da função constante, temos que introduzir um produto interno não usual. Deixamos os detalhes desta definição para mais tarde. Salientamos também que a demonstração do teorema acima [28] depende da medida e do produto interno do espaço de Hilbert considerado.

Por estas razões, este capítulo é heurístico. Um rigor maior será tomado no próximo, quando reordenamos matematicamente, até onde soubermos fazer, o raciocínio que leva ao espaço de Hilbert aqui tomado como ponto de partida.

Portanto, nós vamos assumir que haja autofunções e obter as suas propriedades. Estaremos assim assumindo que o operador $-i\mathcal{L}$ deverá ter uma base ortonormal infinita em que ele é *diagonal*. O fato de um operador ser auto-adjunto não implica na existência de uma base de autofunções, por isto precisamos acrescentar esta hipótese.

3.2 O problema unidimensional geral

Considerando a Hamiltoniana em (3.1) em uma dimensão, sua integrabilidade permite em princípio obtermos variáveis de ângulo, θ , e ação, J , em termos das quais H toma a forma

$$H = H(J) .$$

A equação de autovalores para o operador de Liouville nestas variáveis se escreve como

$$\mathcal{L}f = \frac{df}{dt} = i\lambda f \tag{3.4}$$

$$\frac{\partial H}{\partial J} \frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{\partial H}{\partial \theta} \frac{\partial f}{\partial J} = i\lambda f . \tag{3.5}$$

Como H não depende de θ , f pode ter qualquer dependência em relação a J , $f(\theta, J) = g(J)t(\theta)$. Nesta separação de variáveis acaba por ser redundante a função g , pois J é uma constante no tempo e assim o será qualquer função de J .

Definindo a frequência do movimento no nível de energia $E = H(J)$ como

$$\omega(J) \equiv \frac{\partial H}{\partial J} \tag{3.6}$$

A solução geral para f se escreve portanto na forma

$$f(\theta) = C \exp(i \frac{\lambda}{\omega(J)} \theta) . \tag{3.7}$$

Devemos escolher $\lambda(J) = n\omega(J)$, o que leva os autovalores a mudarem com a energia. Esta escolha é justificada considerando a periodicidade no ângulo θ que as variáveis dinâmicas têm, $f(\theta + 2\pi) = f(\theta)$. Obtemos assim o conjunto enumerável de funções de base,

$$f_n(\theta) = e^{in\theta} \, , \tag{3.8}$$

que é exatamente a base das expansões em séries de Fourier, para cada superfície de energia.

Cada função de base está definida em toda a superfície de energia $E = H(J)$. Consideremos uma função F qualquer e calculemos sua evolução temporal. Escrevendo F em termos da base, temos

$$F(J, \theta) = \sum_n C_n(J) e^{in\theta}$$

em que $C_n(J) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} F(J, \theta) e^{-in\theta} d\theta$. A dependência temporal está implícita na variável θ . Considerando uma trajetória específica para θ , temos

$$\theta(t) = \theta_0 + \omega(J)t \, .$$

Portanto

$$F(t) = \sum_n C_n(J) e^{in(\theta_0 + \omega(J)t)} \, .$$

Incluindo nos coeficientes C_n a dependência temporal de F , temos

$$F(t) = \sum_n C'_n(J, t) e^{in\theta_0} \tag{3.9}$$

$$\text{em que} \quad C'_n(J, t) = C_n(J) e^{in\omega(J)t} \tag{3.10}$$

Decompondo os coeficientes C'_n da expansão em parte real e imaginária, obtemos as equações

$$\begin{aligned} u_n &= \text{Re } C'_n & v_n &= \text{Im } C'_n \\ \dot{u}_n &= -n\omega(J)v_n & \dot{v}_n &= n\omega(J)u_n \, , \end{aligned} \tag{3.11}$$

ou seja,

$$\dot{u}_n = -\lambda_n v_n \quad \dot{v}_n = \lambda_n u_n . \quad (3.12)$$

Sabemos que uma função fica completamente determinada se conhecermos os coeficientes de sua expansão em série. Portanto, com estes cálculos, determinamos a evolução de qualquer variável dinâmica F , bastando para isto resolver o sistema (3.12). As equações (3.12) admitem uma outra interpretação, que é a de encarar os coeficientes como detentores de uma dinâmica de um conjunto de osciladores. Introduzindo a Hamiltoniana

$$\mathcal{H}_J(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \sum_n \frac{\lambda_n(J)}{2} (u_n^2 + v_n^2) \quad (3.13)$$

vemos que ela determina a evolução temporal de toda variável dinâmica F do nosso sistema original. A informação sobre o sistema original está evidenciada no espectro $\{\lambda_n(J)\}$ do operador de Liouville.

Em resumo, dada uma variável dinâmica F , com $F(0) = F_0(J, \theta_0)$, decompomos F_0 em série de Fourier, obtendo um conjunto de constantes

$$(u_n(0), v_n(0))$$

que são as condições iniciais para a Hamiltoniana $\mathcal{H}$. A solução do sistema (3.12) nos fornece a evolução temporal de F .

Cabe aqui um paralelo com a Mecânica Quântica, na qual temos a equação de Schrödinger dependente do tempo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle$$

para uma função de onda $|\psi\rangle$ qualquer. Expandindo $|\psi\rangle$ em termos das autofunções de H , temos

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) |\phi_n\rangle ,$$

que substituída na equação de Schrödinger fornece para C_n

$$\dot{C}_n = -i E_n / \hbar C_n$$

que são as equações de um conjunto de osciladores governando a dinâmica dos coeficientes.

3.2.1 O oscilador harmônico e outros exemplos

É muito difícil fazer-se um estudo teórico sem nos debruçarmos sobre o oscilador harmônico. Este problema é como um “porto seguro” onde nossa intuição, se falhar, certamente pode ser corrigida com alguns cálculos simples.

Nosso objetivo com esta seção é construir um problema de autovalores para o oscilador clássico. Partimos da equação de evolução temporal de uma variável dinâmica

$$\begin{aligned}f: \mathbf{R}^2 &\rightarrow \mathbf{C} \\ \frac{df}{dt} &= [f, H]\end{aligned}\tag{3.14}$$

em que $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2}$. Se f é uma autofunção do operador de Liouville

$$\mathcal{L}f = i\lambda f$$

temos da equação (3.14)

$$i\lambda f = \frac{\partial f}{\partial q} \frac{p}{m} - \frac{\partial f}{\partial p} m\omega^2 q$$

Supondo uma solução do tipo $f(q, p) = \alpha q + \beta p$, $\alpha, \beta \in \mathbf{C}$, obtemos o sistema linear

$$\begin{aligned}\frac{\alpha}{m} &= i\lambda\beta \\ -m\omega^2\beta &= i\lambda\alpha,\end{aligned}$$

de onde tiramos $\lambda = \pm\omega$ e $\alpha = \pm im\omega\beta$, obtendo as soluções

$$f_1(q, p) = \beta(p + im\omega q)\tag{3.15}$$

$$f_{-1}(q, p) = \beta(p - im\omega q)\tag{3.16}$$

que podem ser normalizadas segundo o produto interno definido em (3.2) escolhendo $\beta = 1/\sqrt{2mE}$, $E = H(p, q)$.

Obtivemos duas autofunções escolhendo a forma de f como linear em q e p . Notemos também a semelhança entre f_1 e o operador de levantamento a^+ em mecânica quântica. Um cálculo análogo mostra que as funções

$$f_\nu = (p + im\omega q)^\nu$$

são autofunções correspondentes ao autovalor $\lambda = \nu\omega$, com ν real qualquer. Em princípio, poderíamos escolher λ continuamente sobre a reta real, mas o fato de trabalharmos apenas com funções periódicas, faz com que devamos escolher ν inteiro. O porquê da periodicidade fica mais claro quando trabalhamos com variáveis de ângulo e ação.

A Hamiltoniana do oscilador toma a forma

$$H = \omega J$$

e a equação de autovalores

$$i\lambda f = \frac{\partial f}{\partial \theta} \omega,$$

pois $\frac{\partial H}{\partial \theta} = 0$.

Claramente $f = e^{i\frac{\lambda}{\omega}\theta}$ é solução, mas a condição $f(\theta + 2\pi) = f(\theta)$, uma vez que os pontos θ e $\theta + 2\pi$ são o mesmo no espaço de fases, força $\lambda = n\omega$. Deve ficar claro no entanto que isto não se trata de uma *quantização* do operador de Liouville.

Na seção anterior, obtivemos uma base de funções para o problema unidimensional geral que era exatamente a base de expansão em série de Fourier. É claro que o mesmo ocorre aqui

$$f_n = e^{in\theta}$$

com a diferença que $\lambda = n\omega$ é constante quando mudamos de superfície de energia, pois a frequência do oscilador é a mesma para qualquer energia.

Nas variáveis coordenada e momento usuais, podemos constatar uma propriedade interessante das autofunções do operador de Liouville. Temos que

$$f_n = N(n)(p + im\omega q)^n$$

em que $N(n)$ é um fator de normalização e $f_{-n} = f_n^*$, em que $*$ denota conjugação complexa. Lembrando que $f_n : \mathbf{R}^2 \rightarrow \mathbf{C}$, podemos trabalhar com a representação complexa do plano $\mathbf{R}^2$, definindo a variável

$$z = p + imwq \, .$$

Assim, as funções f_n são a base da série de Taylor. As funções f_{-n} podem ser escritas como

$$f_{-n}(z) = \frac{N'(n)}{z^n}$$

uma vez que zz^* é proporcional à energia, e apenas altera o fator de normalização. Reconhecemos o conjunto $\{f_n, f_{-n}\}$ como a base das expansões em série de Laurent, que justamente gera todas as funções C^∞ .

Para um potencial completamente geral em uma dimensão, não podemos explicitar as frequências $\omega(J)$ e o espectro do operador de Liouville $\lambda_n = n\omega(J)$. Apenas sabemos que existe uma variável de ação J em termos da qual $H = H(J)$ e uma variável de ângulo a ela conjugada. Para potenciais $V(q) = kq^{2n}$, podemos obter facilmente a dependência de H em relação a J e também as frequências $\omega(J) = \frac{dH}{dJ}$. Como

$$J = \oint p \, dq \, ,$$

temos, para

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + kq^{2n} \, ,$$

que

$$J = 4 \int_0^{(E/k)^{1/2n}} \sqrt{2m(E - kq^{2n})} \, dq \, ,$$

Fazendo a mudança de variável $q = x(E/k)^{1/2n}$, obtemos

$$\begin{aligned} J &= 4 \left(\frac{E}{k} \right)^{1/2n} \int_0^1 \sqrt{2mE(1 - x^{2n})} dx \\ J &= cE^{\frac{n+1}{2n}} \, , \end{aligned}$$

em que $c = 4 \sqrt{\frac{2m}{k^{1/2} \Gamma^2 n}}$ é uma constante. Portanto

$$H(J) = c^{-1} J^{\frac{2n}{n+1}}$$

$$\text{e } \omega(J) = \frac{2n}{n+1} c^{-1} J^{\frac{n}{n+1}}.$$

3.3 Sistemas com mais de um grau de liberdade

Como já dissemos, nosso interesse primordial em estudar o operador de Liouville e suas autofunções foi o de linearizar as equações de Hamilton de um fluxo caótico. É sabido que o caos só pode surgir se temos um sistema Hamiltoniano com mais de um grau de liberdade, se independente do tempo. Vamos também nos restringir ao caso em que o potencial $V(q)$ em (3.1) limita, para cada energia E , o movimento no espaço de configurações. Esclarecer como a teoria de espaços de Hilbert funciona em sistemas com mais de um grau de liberdade é o objetivo desta seção. O caso bidimensional será tomado como exemplo na maior parte das equações, a fim de evitar a profusão de índices.

Dada uma condição inicial $(\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0))$ em um sistema autônomo em dimensão dois, sua evolução segundo as equações de Hamilton traça uma trajetória no espaço de fases. Esta trajetória evidentemente conserva a energia ficando portanto restrita à superfície

$$E = H(q_1, p_1, q_2, p_2) .$$

As variáveis dinâmicas estão implicitamente sujeitas às equações de Hamilton. Sendo U_t tal que $U_t(q(0), p(0)) = (q(t), p(t))$ temos

$$U_t f(q, p) = f(U_t(q, p)) \tag{3.17}$$

em que f é uma variável dinâmica.

Portanto, apesar de que as variáveis dinâmicas estejam definidas em todos os pontos do espaço de fases, podemos restringi-las a uma superfície de energia, como fizemos no caso unidimensional, quando ficou claro que o espectro do operador de Liouville depende de E (veja eq. 3.13). Da mesma forma, as autofunções do operador de Liouville serão buscadas para E fixada.

Primeiramente vamos considerar o caso integrável em que H pode ser escrita apenas em termos de duas ações. O caso integrável “ressonante”, em que as duas constantes de movimento em involução são $F_1 = H$ e $F_2 = J_1$ e portanto $H = H(J_1, J_2, \theta_1)$, não apresentaria dificuldades. Isto porque fora das separatrizes, onde os vetores $\mathbf{J} \nabla F_i$ são linearmente dependentes ($\mathbf{J}$ é a matriz simplética), o raciocínio vale. A discussão nas separatrizes pode ser feita em analogia aos toros irracionais.

Tomamos H escrita em termos de J_1 e J_2

$$H = H(J_1, J_2) .$$

A equação de autovalores toma a forma

$$\frac{\partial H}{\partial J_1} \frac{\partial f}{\partial \theta_1} - \frac{\partial H}{\partial \theta_1} \frac{\partial f}{\partial J_1} + \frac{\partial H}{\partial J_2} \frac{\partial f}{\partial \theta_2} - \frac{\partial H}{\partial \theta_2} \frac{\partial f}{\partial J_2} = -i\lambda f$$

que podemos resolver por separação de variáveis. Sendo $f = f_1(\theta_1)f_2(\theta_2)$, temos

$$\omega_1(J_1, J_2) \frac{1}{f_1} \frac{df_1}{d\theta_1} + \omega_2(J_1, J_2) \frac{1}{f_2} \frac{df_2}{d\theta_2} = i\lambda , \quad (3.18)$$

donde

$$f_1(\theta_1) = e^{\frac{i\nu_1\theta_1}{\omega_1}} \quad f_2(\theta_2) = e^{\frac{i\nu_2\theta_2}{\omega_2}}$$

com $\nu_1 + \nu_2 = \lambda$. Novamente a condição de periodicidade de f_1 e f_2 implica que $i\nu_1$ e $i\nu_2$ são imaginários puros, que $\nu_1 = n\omega_1$ e $\nu_2 = m\omega_2$.

Estas condições trazem uma novidade em relação ao cenário unidimensional. Considere J_1 , $E = H(J_1, J_2)$, n_o e m_o escolhidos de modo que

$$\lambda = n_o\omega_{1o} + m_o\omega_{2o}$$

esteja especificado. Quando mudamos de toro, variamos J_1 (J_2 varia também, amarrado à condição de energia fixa) e obtemos novas frequências ω_1 e ω_2 . Precisamos encontrar n e m inteiros tais que

$$\lambda = n\omega_1 + m\omega_2 .$$

Mas isto não é possível, exceto em casos patologicamente simples, como no oscilador harmônico bidimensional, em que ω_1 e ω_2 são independentes de $\mathbf{J}$. Partindo de um toro onde ω_{1o}/ω_{2o} é racional, a existência do novo par n, m implica que ω_2/ω_{2o} , também é racional, uma condição que não podemos satisfazer com apenas um parâmetro para variar, qual seja J_1 . Temos portanto

$$f_{nm}(\theta_1, \theta_2) = g(J_1, J_2) \exp(in\theta_1 + im\theta_2) \quad (3.19)$$

em que g é uma função analítica que normaliza f e $\theta_1, \theta_2 \in [0, 2\pi]$. A autofunção f acima está definida apenas sobre um toro.

Para expandir uma variável dinâmica em termos das autofunções que se restringem aos toros, devemos estender estas últimas sobre toda a superfície de energia. Fazemos isto introduzindo a chamada função característica:

$$\chi(J_1 - J_{10}) = \begin{cases} 1 & \text{se } J_1 = J_{10} \\ 0 & \text{se } J_1 \neq J_{10} \end{cases} \quad (3.20)$$

que é evidentemente uma distribuição.

Temos obtido um conjunto de autofunções

$$h_{J_{10}, nm}(J_1, J_2, \theta_1, \theta_2) = f_{nm}(\theta_1, \theta_2) \chi(J_1 - J_{10}) \quad (3.21)$$

definidas sobre toda a superfície de energia, mas este conjunto não é enumerável. Considerar apenas os toros racionais, onde $\omega_1/\omega_2 = p/q$, com p e q inteiros sem múltiplos entre si, é a tentação natural. O resultado abaixo indica que, na verdade, não se trata de uma escolha, mas de uma consequência natural do formalismo.

Vamos agora mostrar que sobre um toro irracional toda autofunção tem autovalor $\lambda = 0$.

De fato, se f está sobre um toro irracional, consideremos o valor de f num ponto arbitrário $\theta_{10}, \theta_{20}, f(\theta_0)$, e calculemos sua evolução temporal

$$f_{nm}(\theta(t)) = f(\theta_0) \exp(i(n\omega_1 + m\omega_2)t) .$$

Sabemos que $\theta(t) \neq \theta_0$ para todo t , mas para

$$t_k = \frac{2k\pi}{n\omega_1 + m\omega_2}$$

a função f volta a seu valor inicial, isto é, $f(t_k) = f(0)$. Obtemos um conjunto denso de pontos no toro irracional onde a função f assume o mesmo valor. Portanto, sendo analítica, f é constante neste toro e necessariamente seu autovalor se anula.

Este tipo de autofunção nada acrescenta, pois para expressarmos uma função analítica podemos usar as autofunções de autovalor zero (constantes) dos toros racionais vizinhos aos toros irracionais.

Estamos agora em condições de expressar qualquer função analítica definida sobre uma superfície de energia em termos da base (3.21)? Se toda expansão em série tem coeficientes univocamente determinados pela função a ser expandida, responde se positivamente a esta questão.

Dada uma função G , sua expansão em cada toro racional é claramente única. A restrição de uma função analítica a uma subvariedade da variedade de energia constante é também analítica. Definimos portanto

$$G_\tau(J_1, J_2, \theta_1, \theta_2) = \sum_n \chi(J_1 - J_{1n}) G(J_1, J_2, \theta_1, \theta_2) \quad (3.22)$$

em que J_{1n} cobre todos os toros racionais, na medida em que n varia. Cada termo da série em n pode ser expressado em termos da base de funções:

$$g_n = \chi(J_1 - J_{1n}) G \quad \text{e} \quad (3.23)$$

$$g_n = \sum_k C_{kn} g(J_{1n}, J_{2n}) \exp(in\theta_1 + im\theta_2) , \quad (3.24)$$

$$\text{logo} \quad G_\tau(J_1, J_2, \theta_1, \theta_2) = \sum_{k,n} C_{nm} h_{nm}(J_1, J_2, \theta_1, \theta_2) \quad (3.25)$$

As expansões de G_r são únicas, mas podemos dizer o mesmo para as funções completas G ? Examinando a condição de continuidade de G , vemos que não pode haver $F \neq G$, com F também analítica, tal que F tenha $F_r = G_r$ como projeção. Pois se F é diferente de G , então F é diferente de G em um aberto, que seguramente contém toros periódicos, onde sua projeção F_r certamente diferirá de G_r .

Assim, tendo G definida em termos da base de autofunções sobre todos os toros racionais, seu valor num toro irracional, i.e. com $\omega_1/\omega_2 = \rho$ e $\rho \in \mathbf{R}$, é obtido por continuidade

$$G(\text{pontos do toro irracional}) = \lim_{\mathbf{z} \in \text{toro racional}} G(\mathbf{z}) .$$

Note-se a diferença entre fazer um limite de funções aproximantes G_n tendendo para G e definidas no mesmo ponto $\mathbf{z}$, onde quer ele esteja, e o processo de limite que aqui tomamos.

No caso integrável em que ocorrem separatrizes, tomamos um processo de limite semelhante.

Vimos que os toros racionais, onde existem famílias de órbitas periódicas, são a moradia das autofunções não-constantes do operador de Liouville. Veremos na próxima seção que as trajetórias periódicas mantêm este lugar privilegiado mesmo no caso caótico, quando elas estão densamente espalhadas na superfície de energia.

3.3.1 Não integrabilidade e órbitas periódicas

Suponhamos conhecida uma solução para o problema de autovalores com a Hamiltoniana $H(J_1, \theta_1, J_2, \theta_2)$ não integrável:

$$\frac{df}{dt} = [f, H] = i\lambda f .$$

Esta equação contém derivadas parciais em todas as direções da superfície de energia constante, em geral, mas podemos olhá-la numa direção específica que é a de uma trajetória passando pelo ponto $(J_{10}, \theta_{10}, J_{20}, \theta_{20}) = \mathbf{a}_0$.

A equação de autovalores acima sugere que f será sempre periódica quando vista em função do tempo, isto é,

$$f([J_1, J_2, \theta_1, \theta_2](t)) = f\left([J_1, J_2, \theta_1, \theta_2]\left(t + \frac{2\pi}{\lambda}\right)\right).$$

Adiante, formalizamos esta propriedade.

Definimos o *projector* Π que atua sobre as funções do espaço de Hilbert:

$$\Pi(\mathbf{a}_0) : C^\infty(\mathbf{R}^{2N}) \rightarrow C^\infty(\mathbf{R}) \quad (3.26)$$

$$f(\mathbf{J}, \theta) \rightarrow f(\mathbf{J}(s), \theta(s)) = g_{\mathbf{a}_0}(s), \quad (3.27)$$

em que s é o parâmetro da trajetória iniciada em $\mathbf{a}_0$. Na verdade Π não passa da função característica da órbita passando por $\mathbf{a}_0$. Introduzimos esta nova notação para evidenciar o papel da condição inicial $\mathbf{a}_0$, que define completamente a trajetória ali iniciada, para todo tempo t .

Se por $\mathbf{a}_0$ passa uma órbita periódica de período T_a , temos que $g(s(T_a)) = g(s(0)) = g(0)$, em que deixamos g sem seu índice por não haver possibilidade de confusão. Podemos supor que a trajetória esteja parametrizada pelo tempo e daí concluir que g deve ter a seguinte dependência em relação a $s = t$:

$$g_{\mathbf{a}_0}(s) = g_0 \exp i \frac{2\pi n s}{T_a} \quad \text{com } n \in \mathbf{Z} \quad (3.28)$$

Logo,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \Pi(\mathbf{a}_0) f &= \frac{d}{ds} g(s) \\ \Pi(\mathbf{a}_0) \frac{d}{dt} f &= i \frac{2\pi n}{T_a} g(s) \\ \lambda &= \frac{2\pi n}{T_a}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Até aqui $\mathbf{a}_0$ é arbitrário, mas como λ é um só para cada autofunção, isto acaba por fixar $\mathbf{a}_0$.

A relação (3.29) entre o espectro do operador de Liouville e os períodos das órbitas prova uma afirmativa feita em [26], acerca da autocorrelação de uma

variável dinâmica caótica. Vemos que também no caso caótico as autofunções são distribuições sobre subvariedades da superfície de energia. Calculando f sobre um ponto $\mathbf{b}_0$ onde passa uma órbita periódica de período $T_b \neq T_a$, temos

$$U_t f(\mathbf{b}_0) = f(b(t, \mathbf{b}_0)) ,$$

em que U_t é o operador unitário $\exp -\mathcal{L}t$. Aplicamos a equação acima para $t = T_b$. Neste caso, o lado esquerdo resulta simplesmente $f(\mathbf{b}_0)$ enquanto o lado direito fornece, tendo em vista que f é uma autofunção com autovalor $\lambda = 2\pi n/T_a$,

$$\exp\left(\frac{2i\pi n T_b}{T_a}\right) f(\mathbf{b}_0) .$$

Logo,

$$\left[\exp\left(\frac{2i\pi n T_b}{T_a}\right) - 1\right] f(\mathbf{b}_0) = 0$$

e portanto $f(\mathbf{b}_0) = 0$ para qualquer $\mathbf{b}_0$ fora da trajetória de período T_a .

Por outro lado, tentarmos uma autofunção num ponto cuja órbita é não periódica, isto é, densa na superfície de energia, concluímos, de maneira semelhante à análise do toro irracional da seção anterior, que $\lambda = 0$ sobre qualquer órbita ergódica.

A coerência entre os tratamentos para o caso integrável, em que as autofunções são não nulas sobre um toro racional, e o caso caótico, em que as autofunções só não se anulam sobre órbitas de mesmo período, está no fato de haver sobre os toros racionais famílias a um parâmetro de órbitas de mesmo período. A ligação mais elementar portanto ocorre entre as órbitas periódicas e as autofunções do operador de Liouville. A extensão das autofunções sobre variedades de dimensão maior que um, como os toros, só se dá no caso integrável, mais restrito.

A expansão em série em termos das autofunções caóticas é única para funções analíticas, devido simplesmente à continuidade destas.

As funções características e os *projetores* aqui introduzidos têm na Mecânica Quântica os similares projetores. Escrever o operador identidade através

da soma de projetores [29]

$$\mathbf{1} = \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$$

foi basicamente o que transposemos para a Mecânica Clássica. Entretanto, vimos que nossa resolução da identidade é “esburacada”, no sentido de que só temos dela garantia sobre um conjunto denso na superfície de energia. Isto não nos causa problema, pois com isto podemos expandir de maneira única qualquer função contínua, em particular as funções C^∞ , os elementos do espaço de Hilbert.

3.4 O princípio da uniformidade

Tendo em vista que as autofunções não podem ser estendidas além de subconjuntos de medida nula na superfície de energia, a definição de produto interno (3.2) tem de ser modificada. Se não o fazemos, as autofunções têm norma nula. Por isto, para chegarmos à resolução da identidade, precisamos atribuir um peso delta às subvariedades invariantes *elementares*³, com respeito ao fluxo Hamiltoniano. Estas são as órbitas periódicas, nos casos caótico e misto, ou famílias de órbitas periódicas - os toros racionais - no caso integrável.

O que seria um projetor sobre as órbitas (ou famílias de órbitas) periódicas? É o que passamos a expor.

A idéia básica que utilizamos do trabalho de Hannay e Ozorio de Almeida é o seletor de órbitas periódicas. Sendo $\mathbf{r}_0$ um ponto qualquer do espaço de fases e $\mathbf{r}_t = \mathbf{r}_t(\mathbf{r}_0)$ o ponto para o qual $\mathbf{r}_0$ se move no tempo t , tem-se que a delta de Dirac

$$\delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_t) ,$$

³A superfície de energia sempre é uma subvariedade invariante numa Hamiltoniana independente do tempo. Nomear por ‘subvariedades invariantes *maximais*’ as órbitas periódicas pode confundir, por isto decidi que o mais correto seria nomeá-las por *elementares*.

considerada como função de $\mathbf{r}_0$, se anula sempre que $\mathbf{r}_0$ não está numa órbita periódica, para qualquer $t > 0$. Entretanto, como todos os pontos de uma mesma órbita fechada têm o mesmo período, a integral da delta acima não tem um valor finito. Sobre um pequeno volume no espaço de fases contendo o ponto $\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}_t$, sua integral é dada por

$$\left| \det \left(\frac{\partial \mathbf{r}_t}{\partial \mathbf{r}_0} - \mathbf{I} \right) \right|^{-1},$$

que diverge porque o posto da matriz $\left(\frac{\partial \mathbf{r}_t}{\partial \mathbf{r}_0} - \mathbf{I} \right)$ é menor que sua dimensão $(2N \times 2N)$ - uma condição associada ao contínuo de pontos satisfazendo $\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}_t$ localmente. O número de linhas nulas nesta matriz é um para uma órbita periódica isolada e N para um toro racional.

Para eliminar esta divergência, divide-se a função delta por uma média no tempo de uma função delta borrada em torno do ponto $\mathbf{r}_0$. Passamos a explicar como se constrói esta delta borrada e qual o seu valor para os casos integrável e caótico. O caso misto, quando o sistema tem ainda regiões regulares, fica fora da discussão.

Definamos a função de $\mathbf{r}$

$$\langle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_t) \rangle_T = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_t) dt, \quad (3.30)$$

em que $\mathbf{r}_t$ é o ponto para onde $\mathbf{r}_0$ (aqui considerado como parâmetro) se move no tempo t e o índice T do lado direito denota que a média $\langle \cdot \rangle$ foi feita no tempo. Observando a eq.(3.30), vemos que se $\mathbf{r}$ está na variedade gerada pelo fluxo a partir de $\mathbf{r}_0$, fatalmente será igual a $\mathbf{r}_t$, para algum t , e só neste caso a integral em (3.30) não se anula. É fácil ver que a função definida acima tem integral sobre $\mathbf{r}$ igual a um invertendo as integrações. A barra no sinal de integral é para indicar que se está omitindo um pequeno intervalo em torno de $t = 0$ na integração. A razão para tanto ficará clara a seguir.

Quando o sistema está num regime caótico, exceto para condições iniciais num subconjunto de medida (Lebesgue) nula, a órbita de um ponto é densa

na superfície de energia. Isto implica no fato de que as médias no tempo são iguais às médias de configuração (no espaço de fases) para sistemas ergódicos. Para um sistema integrável, um ponto típico estará num toro irracional, e o cobrirá todo, lembrando que num toro irracional as frequências independentes são incomensuráveis, o que leva à ausência de órbitas fechadas. Neste último caso, o ponto $\mathbf{r}_t$ está constrangido a se mover numa variedade de dimensão N . Nestes casos extremos, a função delta mediada no tempo resulta portanto em

$$\langle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_t) \rangle_T = \begin{cases} \frac{\delta(E - H)}{\int \delta(E - H) d^{2N} \mathbf{r}_0} & \text{sistema caótico e} \\ \frac{\delta(I_0 - I(\mathbf{r}))}{\int \delta(I_0 - I(\mathbf{r})) d^{2N} \mathbf{r}_0} & \text{sistema integrável} \end{cases}, \quad (3.31)$$

em que E é a energia de $\mathbf{r}_0$, no caso caótico, e I_0 representa a N -upla de ações iniciais de $\mathbf{r}_0$, no caso integrável.

A eq.(3.31) se aplica para todos os pontos no espaço de fases, exceto num conjunto de medida nula, que são os pontos nas órbitas periódicas. Evidentemente, os pontos nas órbitas periódicas voltam a si mesmos depois de um tempo t' e portanto não servem para realizar médias *em todo lugar* (toros no caso integrável e superfície de energia no caso caótico). Para formular um sentido no qual as relações da eq.(3.31) valem em todo lugar mesmo, são introduzidas as deltas borradas, com um parâmetro ϵ sendo uma medida do borrão:

$$\langle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_t) \rangle_T \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T \delta_\epsilon(\mathbf{r} - \mathbf{r}_t) dt, \quad (3.32)$$

em que o limite em ϵ é tomado depois do limite $T \rightarrow \infty$. O princípio da uniformidade, tal como enunciado em [5], se baseia na hipótese de que a ordem dos dois limites pode ser trocada.

O seletor de órbitas periódicas fica definido como

$$\frac{\delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_t)}{\langle \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_t) \rangle_T}. \quad (3.33)$$

O fato de se colocar no denominador a delta borrada explica porque é necessário excluir-se $t = 0$ do intervalo de integração. O seletor (3.33) não mais tem uma integral divergente, porque a delta no denominador exclui a possibilidade de termos dois pontos com o mesmo período sendo contados, pois estariam na mesma superfície de energia ou no mesmo toro racional, onde a delta no denominador diverge e o anula.

O fator no denominador contém, como está explícito nas relações (3.31), funções delta. Elas são “canceladas” com as que aparecem no numerador, o que, na verdade, define a razão (3.33) como uma distribuição cujo efeito sobre as funções, quando integrada, é projetá-las nas órbitas periódicas.

O princípio da uniformidade pode agora ser enunciado. Tomando o seletor como uma densidade de órbitas periódicas no espaço de fases, sua média sobre todos os possíveis tempos de retorno é um:

$$\left\langle \frac{\delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_t)}{\langle \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_t) \rangle_T} \right\rangle_T = \frac{\lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2T} \oint_{-T}^T \delta_t(\mathbf{r} - \mathbf{r}_t) dt}{\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \oint_{-T}^T \delta_t(\mathbf{r} - \mathbf{r}_t) dt} = 1 \quad (3.34)$$

A idéia de divisão e cancelamento de deltas, mesmo que justificada dois parágrafos acima, é de difícil compreensão. Procurando evitá-la, acabamos por construir um enunciado que implica no princípio de uniformidade. Não usamos as deltas borradas e assim não há limites para se efetuar. O fundamental é que construímos um *seletor* de órbitas periódicas para cada superfície de energia.

Para posterior comparação, convém transcrevermos a definição das *intensidades das órbitas periódicas*. Observando que (3.33) pega órbitas de período t sem fixar sua energia, pode-se imaginar que fixando a energia e integrando sobre todo o espaço de fases, estaremos pegando todas as órbitas periódicas para uma energia fixa. Assim, a equação abaixo

$$\int \frac{\delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_t)}{\langle \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_t) \rangle_T} \delta(E - H(\mathbf{r}_0)) d^{2N} \mathbf{r}_0 = \sum_j I_j \delta(t - T_j) \quad (3.35)$$

define e atribui intensidades I_j às órbitas periódicas de período T_j (ou aos toros racionais, cujas órbitas têm período T_j).

As intensidades I_j , apesar de diferirem de acordo com o regime do fluxo, caótico ou integrável, somam sempre

$$\sum_{T_j < T} I_j \underset{T \rightarrow \infty}{=} 2\Sigma(T), \quad (3.36)$$

em que $\Sigma = \Sigma(E)$ é a área da superfície de energia. Para obter (3.36), basta tomar a média no tempo de (3.35) e usar (3.31).

3.5 Obtenção da medida

Nesta seção, obtemos uma forma para a medida de Dirac no espaço de fases. Ela atribui um peso delta às órbitas periódicas, mas não é necessário contar-se as repetições das órbitas, porque o objeto com que definimos a medida é o traço, a imagem no espaço de fases, de cada órbita.

Consideremos primeiramente um exemplo em uma dimensão para este tipo de construção. Iremos obter uma medida com pesos delta de modo que a integral da função característica dos racionais no intervalo $[0, 1]$ resulte em um em vez de zero. No caso da medida de Lebesgue, a integral da função característica dos racionais se anula. Escrevemos a função característica dos racionais como

$$\chi_{\text{racionais}}(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } x \in \mathbf{Q}, \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Procuramos uma medida para a qual a equação

$$\int_0^1 \chi_{\text{racionais}} d\mu = \int_0^1 dx \quad (3.37)$$

valha. Claramente, $d\mu$ pode ser escrita em termos de funções delta sobre os números racionais multiplicada pela medida usual dx :

$$d\mu = \sum_{p,q}'' a_{pq} \delta(x - p/q) dx,$$

em que " indica que p e q são coprimos. Não podemos todavia atribuir importância igual a todos os números racionais, uma vez que isto faria (3.37) divergir. Uma maneira de definir $d\mu$ é portanto a seguinte:

$$\begin{aligned} d\mu &= k \sum_{p,q}^{\infty} \frac{1}{q^3} \delta(x - p/q) dx \\ &= k \sum_q \frac{\varphi(q)}{q^3} \delta(x - p/q) dx, \end{aligned} \quad (3.38)$$

em que k é uma constante e φ é a função de Euler, que conta o número de coprimos de um inteiro dado⁴. A definição acima faz com que a integral em (3.37) convirja, de modo que podemos escolher k fazendo-a igual a um. Entretanto, devemos ressaltar que existem outras escolhas para $d\mu$ que produzem uma integral finita da função característica dos racionais. De qualquer forma, este exemplo ensina que alguma hierarquia precisa ser introduzida para se ter convergência.

No espaço de fases, a medida é determinada pelo fluxo Hamiltoniano: caótico, misto ou integrável. Nos dois primeiros casos, as órbitas periódicas estão isoladas, enquanto que no último, elas aparecem em famílias que folheiam a superfície de energia. Reciprocamente, as variedades invariantes maximais têm dimensão 1, 1 ou 2 (N para um espaço de fase com $2N$ dimensões).

Denotemos por Σ a área da superfície de energia

$$\Sigma(E) = \int \delta(E - H) dq dp. \quad (3.39)$$

Afirmamos que o princípio da uniformidade é decorrência da relação abaixo, definidora da medida $d\mu$:

$$\int \mathbb{1} d\mu = \Sigma, \quad (3.40)$$

em que $\mathbb{1}$ denota a função característica da união de órbitas periódicas numa certa superfície de energia. Para provar esta afirmação, nós vamos deduzir

⁴Observação: $\varphi(1) = 1$.

novamente as fórmulas de soma para as intensidades das órbitas periódicas (veja eqs.(17) e (18) de [5]) usando o modo como elas proliferam para períodos grandes. Adiantamos que persistirá, apesar da relação (3.40), uma certa liberdade na *definição* da medida $d\mu$, mesmo que o peso de cada órbita periódica (ou toro racional) seja não-nulo. Releve-se o uso da palavra *definição* neste momento; ele se tornará mais próprio no capítulo 4.

3.5.1 O caso integrável

No caso integrável, temos famílias de órbitas periódicas sobre a superfície de energia. A ordem que numeramos as autofunções deve ser acompanhada pela numeração dos toros, ou seja, frequências decrescentes. A possibilidade de degenerescência infinita não coaduna com este ordenamento. Mas este tipo de degenerescência ocorre se, e somente se, existe um intervalo aberto (nas ações) com toros assim, o que finalmente significa que o sistema é - dentro deste aberto - um oscilador harmônico bidimensional. Esta exceção não será tratada aqui, pois lidamos com ela de uma maneira mais fácil, desde a determinação das autofunções (confronte com o exemplo unidimensional do oscilador harmônico).

Para selecionar uma família de órbitas introduzimos as funções delta das frequências

$$\delta(\omega_1 - \omega_{1n}) \delta(\omega_2 - \omega_{2n}) .$$

Então temos $d\mu$ dado por

$$d\mu = \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{T_n < T} A_n \delta(\omega_1 - \omega_{1n}) \delta(\omega_2 - \omega_{2n}) d^2 J d^2 \theta .$$

Obtemos os pesos dos toros através da equação (3.40):

$$\begin{aligned} \Sigma &= \int \mathbb{1} d\mu \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{T_n < T} A_n \int \delta(\omega_1 - \omega_{1n}) \delta(\omega_2 - \omega_{2n}) d^2 J d^2 \theta \end{aligned}$$

$$= \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{T_n < T} A_n 4\pi^2 \left| \det_n \left(\frac{\partial^2 H}{\partial J^2} \right) \right|^{-1}$$

em que a notação $\det_n$ significa que o determinante é calculado sobre o toro de número n .

Neste ponto, fazemos uma escolha de A_n que resulta na regra de soma para as intensidades das órbitas periódicas. Esta escolha é sugerida pelos resultados de Hannay e Ozorio de Almeida (veja apêndice I de [5]). Deve ficar claro, no entanto, que não estamos assumindo o princípio da uniformidade para deduzi-lo de novo, porque nosso ponto de partida é a equação (3.40). Escrevemos

$$A_n = \frac{\sum dT_n}{K_{\text{int}}(T)} T_n^{-2}, \quad (3.41)$$

em que

$$K_{\text{int}}(T) = \sum_{T_n < T} \left(\frac{dT_n}{dE} \right) \frac{(2\pi)^2}{T_n^2 \left| \det_n \left(\frac{\partial^2 H}{\partial J^2} \right) \right|}. \quad (3.42)$$

Assumindo que $K_{\text{int}}(T) \sim T$ para T grande, o que provaremos adiante, temos o seguinte

$$\frac{\sum}{T} \sum_{T_n < T} \left(\frac{dT_n}{dE} \right) \frac{(2\pi)^2}{T_n^2 \left| \det_n \left(\frac{\partial^2 H}{\partial J^2} \right) \right|} \stackrel{T \rightarrow \infty}{\sim} \sum, \quad (3.43)$$

que é a regra de soma clássica deduzida a partir do princípio da uniformidade.

Obtemos o limite assintótico de $K_{\text{int}}(T)$ usando que a densidade de órbitas cresce com T^2 , o quadrado do período, para período grande (veja apêndice B). Portanto

$$K_{\text{int}}(T) \approx \int^T \left(\frac{dT}{dE} \right) \frac{(2\pi)^2}{T^2 \left| \det_T \left(\frac{\partial^2 H}{\partial J^2} \right) \right|} \rho(T) dT$$

em que $\rho(T)dT \approx T^2$ é o número de órbitas periódicas entre T e $T+dT$. Como $\frac{dT}{dE}$ e $|\det_T| > 0$ são funções suaves na superfície de energia, sua razão pode ser tirada fora do sinal de integração, pelo teorema do valor intermediário para integrais, resultando em uma constante multiplicativa. Substituindo

na expressão assintótica de $K_{\text{int}}(T)$ a densidade de órbitas $\rho(T)$, temos que $K_{\text{int}}(T) \sim T$.

Em resumo, esta foi uma dedução alternativa do regime assintótico da soma das intensidades das órbitas periódicas no caso integrável (cf. eq.(18) de [5]) a partir da eq.(3.40) e da proliferação de órbitas periódicas.

Podemos agora escrever a definição da medida para o caso integrável

$$d\mu = \lim_{T \rightarrow \infty} d\mu_T, \quad (3.44)$$

em que

$$d\mu_T = \frac{\Sigma}{4\pi^2 K_{\text{int}}(T)} \sum_{T_n < T} \frac{d\Gamma_n}{dE} T_n^{-2} \delta(\omega_1 - \omega_{1n}) \delta(\omega_2 - \omega_{2n}) d^2 J d^2 \theta. \quad (3.45)$$

A expressão acima para $d\mu_T$ contém uma razão de divergências, portanto devemos tomar cuidado para tomar o limite $T \rightarrow \infty$: simultaneamente em $K_{\text{int}}(T)$ e no resto da expressão. Este ponto será discutido novamente no fim desta seção.

3.5.2 O caso caótico

No caso caótico, as órbitas periódicas aparecem isoladas na superfície de energia. Podemos enumerar os períodos das órbitas. Seja Γ_n o domínio (aberto) no espaço de fases contendo apenas uma órbita periódica de período T_n . A união destes abertos é uma cobertura aberta do espaço de fases. Note que apenas as órbitas periódicas primitivas entram nas definições destes conjuntos, pois temos que considerar apenas a localização delas no espaço de fases. Para cada Γ_n , temos uma quádrupla de coordenadas canonicamente conjugadas: $H, T, {}_n q, {}_n p$. Doravante, omitiremos o índice n de ${}_n q$ e ${}_n p$. O primeiro par canônico é formado por H , a função de Hamiltoniana, e T , o tempo ao longo das órbitas. Os pares canônicos, q, p , são as coordenadas restantes, tais que $(q - q_t)$ e $(p - p_t)$ medem o desvio de um ponto no espaço de fases da órbita $\mathbf{r}_t = (H_t, T_t, q_t, p_t) = (E, t, q_t, p_t)$.

Para pescar a órbita de período T_n no domínio Γ_n , precisamos de uma função delta tridimensional

$$\delta(H - H_t)\delta(q - q_t)\delta(p - p_t) .$$

As duas últimas deltas seleccionam a família local de órbitas periódicas no espaço de fases, com a energia como parâmetro. Como já dito, Γ_n contém apenas uma órbita com período T_n , que é aquela seleccionada por fim pela primeira função delta.

Portanto, podemos escrever $d\mu$ como

$$d\mu = \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{T_n < T} A_n \delta(H - H_t) \delta(q - q_t) \delta(p - p_t) dH dT dq dp .$$

Os pesos A_n são novamente obtidos a partir da eq.(3.40):

$$\begin{aligned} \Sigma &= \sum_n A_n \int_{\Gamma_n} \delta(H - E) \delta(q - q_t) \delta(p - p_t) dH dT dq dp \\ &= \sum_n A_n T_n |\det_n(\mathbf{M} - \mathbf{I})|^{-1} , \end{aligned}$$

em que $\mathbf{M}$ é a matriz monodromia reduzida, sem o bloco 2×2 (cuos autovalores são 1) e $\mathbf{I}$ é a matriz identidade.

Seguindo a mesma linha da discussão para o caso integrável, A_n é escolhido de modo que se obtenha a regra de soma para as intensidades das órbitas periódicas no caso caótico:

$$A_n = \frac{\Sigma}{K_{\text{cha}}(T)} , \quad (3.46)$$

em que

$$K_{\text{cha}}(T) = \sum_{T_n < T} \frac{T_n}{|\det_n(\mathbf{M} - \mathbf{I})|} \quad (3.47)$$

e, similarmente, o comportamento assintótico de $K_{\text{cha}}(T) \sim T$ resulta na regra de soma clássica obtida a partir do princípio da uniformidade:

$$\frac{\Sigma}{T} \sum_{T_n < T} \left(\frac{T_n}{|\det_n(\mathbf{M} - \mathbf{I})|} \right) \stackrel{T \rightarrow \infty}{\sim} \Sigma , \quad (3.48)$$

Para o caso caótico, a demonstração de que $K_{cha}(T) \sim T$ pode ser encontrada em [30], agora baseada na proliferação exponencial das órbitas periódicas. Aqui estamos enfatizando que esta proliferação, aliada à equação (3.40), implica na regra de soma para o caso caótico.

Portanto, para um fluxo caótico, $d\mu$ se escreve como

$$\begin{aligned}
 d\mu &= \lim_{T \rightarrow \infty} d\mu_T \\
 d\mu_T &= \frac{\Sigma}{K_{cha}(T)} \sum_{T_n < T} \delta(H - E) \delta(q - q_i) \delta(p - p_i) dH dT dq dp \quad (3.49)
 \end{aligned}$$

Como na eq.(3.45), temos na medida do caso caótico uma razão de divergências, que tem que ser computada antes do limite $T \rightarrow \infty$ ser tomado.

Como as órbitas periódicas aparecem isoladamente na superfície de energia também do caso misto, uma breve digressão sobre este é possível aqui. Em geral, as bifurcações se dão quando os autovalores de M tem módulo 1, que causa $\det(M - I) = 0$. A transição da integrabilidade para a ergodicidade se caracteriza precisamente pelas diversas bifurcações nas famílias de órbitas estáveis. De fato, a hipótese de que Γ_n contenha apenas uma órbita periódica de período T_n não é sempre válida no caso misto, porque na energia em que esta bifurcação ocorre (estamos pensando na energia como parâmetro de caoticidade), todo aberto contém as duas famílias de órbitas dali advindas. Abordamos este ponto novamente no próximo capítulo, mas uma resposta definitiva a respeito do peso correto em torno de uma bifurcação permanece desconhecida. Um caminho que talvez resolva isto pode ser abstraído do problema tratado em [31].

3.5.3 Discussão

Para definir uma medida satisfazendo (3.40), temos uma certa liberdade para escolher os pesos de cada órbita periódica. A escolha particular que fizemos implicou, usando também a maneira como as órbitas periódicas proliferam com períodos crescentes, no princípio da uniformidade. Desta forma,

podemos encarar esta obtenção da medida de Dirac como uma dedução alternativa da uniformidade, mas evidentemente não poderíamos ter feito esta dedução sem o prévio conhecimento do princípio.

A interpretação da relação (3.40) é que $d\mu$ serve para medir áreas (de subvariedades de dimensão $2N - 1$) no espaço de fases através das órbitas periódicas, que, para sistemas com mais de um grau de liberdade, têm dimensão no máximo igual a N (toros racionais).

Uma outra interpretação da medida $d\mu$ é possível. Na eq.(3.35),

$$\int \frac{\delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_t)}{\langle \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_t) \rangle_T} \delta(E - H(\mathbf{r}_0)) d^{2N} \mathbf{r}_0 = \sum_j I_j \delta(t - T_j) ,$$

temos que, do lado esquerdo, o primeiro termo do integrando selecciona órbitas periódicas sem fixar a energia, o que é feito pela função delta restante. Quando tomamos a média no tempo, o lado esquerdo soma as contribuições de todas as órbitas periódicas de uma certa superfície de energia, precisamente o que faz $d\mu$.

E assim segue a regra de soma,

$$\Sigma = \int d\mu = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T \sum_j I_j \delta(t - T_j) dt , \quad (3.50)$$

isto é,

$$\sum_{T_j < T} I_j \xrightarrow{T \rightarrow \infty} 2T\Sigma \quad (3.51)$$

Uma propriedade que se mantém neste enunciado do princípio da uniformidade é a razão de divergências: escapamos do quociente de deltas, mas caímos num quociente de séries divergentes. No próximo capítulo, veremos como isto é na verdade necessário. Além disto, o formalismo que apresentamos fornece as regras de soma em termos apenas das órbitas periódicas primitivas, porque usamos apenas os seus traços geométricos, que podem ser parametrizados como as órbitas periódicas primitivas.

A idéia de que a regra de soma (3.51) é assintótica, independente de um conjunto finito de órbitas periódicas curtas, não contradiz a definição de $d\mu$.

De fato, poderíamos deixar fora da soma que define $d\mu$, equação (3.45) ou (3.49) conforme o caso, um número finito de órbitas periódicas (ou toros racionais) e continuaríamos tendo um subconjunto denso da superfície de energia. A densidade deste subconjunto é o que conta.

Entretanto, para propósitos práticos, numéricos, temos de usar uma aproximação $d\mu_T$ para a medida que leva em conta um subconjunto denso. Isto poderia ser formalizado notando que a superfície de energia é compacta. Assim, da cobertura aberta com os abertos Γ_n , podemos extrair uma subcobertura finita. Sujeita a esta cobertura finita, pode-se definir uma partição da unidade [32]⁵, ou seja, um conjunto de funções ϕ_n satisfazendo:

$$\begin{aligned}\phi_n(x) &= \xi_n(x)\chi_{\Gamma_n} \\ \sum_n \phi_n(x) &= 1 \quad \text{qualquer que seja } x\end{aligned}$$

em que χ_{Γ_n} é a função característica de Γ_n . A medida $d\mu_T$ teria seus pesos A_n multiplicados pela função ϕ_n correspondente. Salta aos olhos a semelhança desta idéia com aquela de borrar deltas (as deltas continuam na medida $d\mu_T$) em torno das órbitas periódicas (leia na seção anterior), mas aqui estaríamos borrando em torno de um número finito delas.

Por outro lado, o raciocínio desenvolvido no parágrafo anterior leva a uma aparente contradição com o caráter assintótico da regra de soma: as órbitas periódicas longas são responsáveis pelo comportamento genérico da soma de intensidades, mas $d\mu_T$ leva em conta apenas um número finito de órbitas.

Teoricamente, compreendemos esta situação imaginando que as órbitas curtas criam *vincos* na superfície de energia. Em torno de seus traços, órbitas mais longas, e com períodos tão grandes quanto se queira, se acumulam. Assim, se se quer contar a contribuição da infinitude (órbitas periódicas com períodos maior que um certo T) pode-se negligenciar algumas órbitas periódicas curtas. Mas em torno de cada uma daquelas que foram negligenciadas, sempre haverá uma que tem período menor (naquela região), que será

⁵‘Unidade’ no caso quer dizer o todo, que é a superfície de energia

então a sua herdeira – a que mais pesa para aquela região. Desta forma, apesar de não-genéricas, as órbitas periódicas mais curtas podem tomar o lugar do conjunto denso de órbitas periódicas na superfície de energia.

Esta análise é bastante conhecida no contexto da fórmula do traço de Selberg, chamada *bootstrapping* [33]. Aqui temos um elemento quantitativo para aplicá-la, qual seja, quanto menor o diâmetro d das vizinhanças Γ_n de uma cobertura aberta finita, mais precisamos de órbitas periódicas.

3.6 O produto interno – aplicações

Nesta seção, estudamos as consequências da definição do produto interno baseado na medida obtida para o caso caótico. Primeiramente normalizamos as autofunções para depois deduzirmos a fórmula de autocorrelação das variáveis dinâmicas em termos de seus valores sobre as órbitas periódicas. Escrevemos $d\mu$ como se $K_{\text{cha}}(T)$ convergisse, isto é, os limites $\lim_{T \rightarrow \infty} d\mu_T$ ficam implícitos.

Dada a medida $d\mu$, definimos o produto interno pela relação

$$\begin{aligned} \langle \cdot, \cdot \rangle &: C_0^\infty(\mathbf{R}^{2N}) \times C_0^\infty(\mathbf{R}^{2N}) \rightarrow \mathbf{C} \\ (f_1, f_2) &\mapsto \langle f_1, f_2 \rangle = \int f_1(\vec{q}, \vec{p}) \overline{f_2(\vec{q}, \vec{p})} d\mu, \end{aligned} \quad (3.52)$$

em que a barra sobre f_2 denota a conjugação complexa. As autofunções são dadas por

$$f_{ni}(T) = N_i \exp\left(\frac{2\pi i n T}{T_i}\right) \chi_i(\vec{q}, \vec{p}),$$

em que χ_i é a função característica da i -ésima órbita periódica e N_i é uma constante de normalização. Encontramos o fator de normalização a partir da seguinte equação:

$$||f_{ni}||^2 = \langle f_{ni}, f_{ni} \rangle = 1.$$

Restringimos nossa atenção ao caso caótico, mas evidentemente as autofunções integráveis podem ser tratadas de maneira análoga. N_i é dado

por

$$N_i = \left(\frac{K_{\text{cha}} |\det(\mathbf{M}_i - \mathbf{I})|}{T_i \Sigma} \right)^{1/2}.$$

Note-se que N é o mesmo para todas as autofunções baseadas na mesma órbita. Estritamente falando, a constante N diverge, mas esta divergência é contornada, pois as manipulações com as autofunções - expansões, cálculo das norma e distâncias - devem ser feitas com a medida $d\mu$ que a cancela (veja abaixo). Podemos também lidar com esta divergência usando um K_{cha} baseado em um número finito de órbitas.

Podemos finalmente escrever a autofunção geral do operador de Liouville da Hamiltoniana caótica:

$$f_{ni}(T) = \left(\frac{K_{\text{cha}} |\det(\mathbf{M}_i - \mathbf{I})|}{T_i \Sigma} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{2\pi i n T}{T_i} \right) \chi_i(\vec{q}, \vec{p}) \quad (3.53)$$

Seja agora $g(\vec{q}, \vec{p})$ uma variável dinâmica. Podemos estudar sua correlação em termos das autofunções do operador de Liouville. Escrevamos a expansão de g em termos das autofunções:

$$g(\vec{q}, \vec{p}) = \sum_{n,i} C_{ni} f_{ni}, \quad (3.54)$$

em que os coeficientes C_{ni} são dados por

$$C_{ni} = \int g(\vec{q}, \vec{p}) f_{ni} d\mu.$$

Primeiramente, notamos que o termo $f_{ni} d\mu$ contém um produto de distribuições do tipo $\chi\delta$, que é bem definido porque χ é finita. Obtemos para este produto

$$f_{ni} d\mu = \left(\frac{T_i \Sigma}{K_{\text{cha}} |\det(\mathbf{M}_i - \mathbf{I})|} \right)^{1/2} \frac{1}{T_i} \exp \left(-\frac{2\pi i n T}{T_i} \right) \times \\ \delta(H - E) \delta(q - q_i) \delta(p - p_i) dq dp dH dT$$

Escrevendo $\tilde{g}_i(T) = g(\vec{q}(T), \vec{p}(T))$, o valor da variável que dinâmica assume na i -ésima órbita, obtemos

$$C_{ni} = \left(\frac{T_i \Sigma}{K_{\text{cha}} |\det(\mathbf{M}_i - \mathbf{I})|} \right)^{1/2} \frac{1}{T_i} \int_0^{T_i} e^{-\frac{2\pi i n T}{T_i}} \tilde{g}_i(T) dT \quad (3.55)$$

A função de autocorrelação

$$C_g(t) = \frac{1}{\Sigma} \langle g(\vec{q}, \vec{p}), g(\vec{q}(t), \vec{p}(t)) \rangle \quad (3.56)$$

pode ser calculada em termos dos valores de g apenas sobre as órbitas periódicas, com a medida $d\mu$. O ponto crucial aqui é que, dependendo de a função g ser vista como a função definida em todo lugar no espaço de fases ou sua projeção sobre a base de autofunções do operador de Liouville, temos de escrever o produto interno em (3.56) com a medida adequada. Pois, claramente, se evoluirmos uma variável dinâmica g , $C_g(t)$ pode ser obtida a partir da média microcanônica

$$\frac{1}{\Sigma} \int g(\vec{q}, \vec{p}) g(\vec{q}(t), \vec{p}(t)) \delta(E - H) d\vec{q} d\vec{p}$$

e esta deve ter o mesmo valor se projetamos g sobre a união de órbitas periódicas. Quando fazemos isto, precisamos calcular

$$\frac{1}{\Sigma} \int g(\vec{q}, \vec{p}) g(\vec{q}(t), \vec{p}(t)) d\mu .$$

Como fizemos no estudo do caso unidimensional, redefinimos os coeficientes da expansão de g de modo que incluam a dependência temporal:

$$g(\vec{q}(t), \vec{p}(t)) = \sum_{n,i} C'_{ni}(t) f_{ni}(0) .$$

Portanto

$$\begin{aligned} C_g(t) &= \frac{1}{N} \sum_{m,j} \sum_{n,i} C_{ni}(0) C'_{mj}(t) \langle f_{ni}, f_{mj} \rangle \\ &= \sum_{n,i} \frac{T_i}{K_{\text{cha}} |\det(\mathbf{M}_i - \mathbf{I})|} e^{\frac{2\pi i n t}{T_i}} |C_{ni}|^2 , \end{aligned} \quad (3.57)$$

em que G_{ni} é a n -ésima componente de Fourier de g ao longo da órbita i :

$$G_{ni} = \frac{1}{T_i} \int_0^{T_i} e^{-\frac{2\pi i n T}{T_i}} \tilde{g}_i(T) dT . \quad (3.58)$$

Na verdade, a autocorrelação (3.57) é real porque $C_g(t) = C_g(-t)$, para sistemas com simetria por reversão temporal. Este resultado pode ser aplicado ou, melhor dizendo, testado numa Hamiltoniana cujas órbitas periódicas são conhecidas. Podemos esperar que a série para C_g convirja rapidamente, porque as instabilidades no denominador de (3.57) crescem rápido. Podemos também expressar a transformada de Fourier de C_g em termos dos valores sobre as órbitas, obtendo a densidade espectral

$$S_g(\omega) = 4\text{Re} \int_0^\infty e^{-i\omega t} C_g(t) dt$$

dada por

$$S_g(\omega) = 4\pi \sum_{ni} \frac{|G_{ni}|^2 T_i}{K_{\text{cha}} |\det(\mathbf{M}_i - \mathbf{I})|} \delta\left(\omega - \frac{2\pi n}{T_i}\right). \quad (3.59)$$

Esta fórmula, por sua vez, já apareceu no capítulo 2 e em [26], no estudo de caos como mecanismo de dissipação.

3.6.1 Acerca dos pesos das órbitas periódicas

Para definir a medida $d\mu$ tanto no caso caótico como no integrável, uma escolha dos pesos das órbitas periódicas foi necessário. Existem outras escolhas que resultam em (3.40), por exemplo dividindo A_n por T_n^2 para fazer K_{cha} (K_{int}) convergirem. Esta é uma liberdade inconveniente, pois poderíamos deduzir uma regra de soma clássica para cada escolha. Nesta seção, examinamos como esta escolha pode ser restrita.

Se definimos novos pesos A'_n

$$A'_i = \alpha_i A_i,$$

as expansões das funções, (3.54), não se modificam, porque os α_i se cancelam com a respectiva constante de normalização N'_i . Portanto, aquelas expansões tipo série de Fourier são invariantes. Por outro lado, a fórmula para a autocorrelação de uma variável dinâmica, (3.57), se altera com esta mudança.

Com a redefinição dos pesos $\mathcal{C}_g(t)$ é transformada em

$$\mathcal{C}'_g(t) = \sum_{n,i} \frac{\alpha_i T_i}{K'_{\text{cha}} |\det(\mathbf{M}_i - \mathbf{I})|} e^{\frac{2\pi i n t}{T_i}} |G_{ni}|^2, \quad (3.60)$$

em que K'_{cha} é dado por

$$K'_{\text{cha}}(T) = \sum_{T_i \leq T} \frac{\alpha_i T_i}{|\det(\mathbf{M}_i - \mathbf{I})|}$$

(evidentemente não estamos considerando todos os α_i 's iguais).

Um artifício bastante usado em mecânica semiclássica (na fórmula do traço de Gutzwiller [34]) pode ser aplicado também aqui para fazer K'_{cha} convergir, fazendo $\alpha_i = e^{-\epsilon T_i}$. Neste caso, tomar o limite $\epsilon \rightarrow 0$ depois de usar a série (3.57) é também uma aproximação a caso de considerarmos um número finito de órbitas. Na prática, apenas um número finito de órbitas é considerado para cálculo dos níveis de energia de um sistema caótico.

É fácil ver que (α_i) , uma seqüência de números reais positivos, tem apenas três comportamentos relevantemente distintos quando $i \rightarrow \infty$. Se ela é limitada, é suficiente considerar os casos em que converge para 0 ou para 1. Nestes casos, vemos que a noção de *hierarquia* das órbitas periódicas faz sentido matematicamente: as órbitas mais longas não podem suplantam individualmente o peso das órbitas mais curtas. Somente se (α_i) diverge, esta hierarquia é modificada. Como no caso de α_i convergindo para zero, o limite assintótico de K'_{cha} é mudado quando $\lim_{i \rightarrow \infty} \alpha_i = \infty$.

É uma questão aberta se cada uma destas três possibilidades faz sentido fisicamente, e estamos tentando obter uma evidência numérica, através da eq.(3.57), para decidir. Adiantamos que o caso de α_i convergindo para 0 é inadequado fisicamente, por causa da ergodicidade, como explicaremos no capítulo seguinte. O caso em que a seqüência (α_i) é ilimitada não tem sentido prático, porque normalmente a instabilidade da órbita periódica torna difícil o acesso numérico a ela, que é o único disponível.

Para $\alpha_i = 1$ e fazendo a variável dinâmica g igual a uma constante, reduzimos a fórmula (3.57) à regra de soma clássica das intensidades das

órbitas periódicas (3.36) [5]. Mas para uma variável dinâmica qualquer, esta equação fornece um método de cálculo da autocorrelação, além do usual, através da média microcanônica.

Capítulo 4

Espaços de Hilbert em Mecânica Clássica

Neste capítulo explanamos a noção de espaços de Hilbert em Mecânica Clássica. Consideramos necessário escrevê-lo porque esta idéia nos parece pouco corrente, apesar de o primeiro trabalho nesta direção datar de 1931 com Koopman [35].

Vários outros autores exploraram os métodos de espaços de Hilbert desde então. Halmos e von Neumann [36] consideram o problema da ergodicidade numa perspectiva muito geral, em que o fluxo Hamiltoniano é um caso particular de um isomorfismo entre espaços de medida. O principal resultado, conhecido posteriormente como Teorema Ergódico de von Neumann (e que de fato apareceu num artigo anterior em alemão) será discutido em sua forma moderna no fim deste capítulo.

O espectro do operador unitário, que contém toda a informação sobre o fluxo Hamiltoniano, é estudado por Sinai em [37], que obtém para sistemas ergódicos um espectro tipo Lebesgue com multiplicidade enumerável. Um espectro *tipo Lebesgue* é basicamente um espectro absolutamente contínuo cujas medidas espectrais são equivalentes à medida de Lebesgue (veja as definições a seguir).

Gel'fand e Pomin [38] são os primeiros a estudar o problema das propriedades do espectro do operador unitário, que gera o fluxo, em variedades de curvatura negativa.

De um longo artigo de Anosov e Sinai [39], aprendemos que, afora no caso de toros bidimensionais, nenhuma função contínua pode ser uma autofunção do fluxo, um teorema de Arnold.

Em revistas especializadas de matemática, há muitos outros trabalhos neste assunto. Nosso objetivo é trazer para uma linguagem mais pedestre este formalismo, discutindo-o em contraste com uma proposta de espaço de Hilbert que é inédita até onde pude investigar [40]. Ela se baseia na introdução de uma medida singular sobre a superfície de energia de um sistema caótico.

Na literatura da física, Prigogine [41] parece ser o primeiro a considerar o problema de autovalores formalmente dado pela equação de Liouville

$$-i \frac{df}{dt} = \mathcal{L}f = \lambda f ,$$

em que f é uma função a valores complexos definida no espaço de fases, chamada *variável dinâmica*:

$$\begin{aligned} f &: \mathbf{R}^{2N} \rightarrow \mathbf{C} \\ (q, p) &\rightarrow f(q, p) . \end{aligned} \tag{4.1}$$

Para o caso do oscilador harmônico, a equação acima tem soluções definidas em todo o espaço de fases. Como vimos no capítulo 3, as autofunções do problema de autovalores são, uma vez imposta a condição de continuidade, a base de funções da série de Laurent para as funções definidas no plano complexo – que é isomorfo ao plano de fases através da relação:

$$\mathbf{z} = p + i\omega q .$$

Osciladores harmônicos com N graus de liberdade levam a funções de várias variáveis complexas $f : \mathbf{C}^N \rightarrow \mathbf{C}$. Evidentemente, qualquer variável dinâmica, eq.(4.1), pode ser expandida nesta base.

Imaginando que a idéia da expansão pode ser estendida a um problema com uma Hamiltoniana qualquer, temos que

$$f(p, q, t) = \sum_k c_k e^{-i\lambda_k t} \varphi_k(p, q) .$$

em que λ_k é o espectro do operador de Liouville e φ_k é a autofunção correspondente (confronte com eq.(1.3.18) de [41]).

Entretanto, as autofunções não necessariamente estão definidas em todo o espaço de fases, pois os autovalores são em geral dependentes da energia. Esta propriedade dos autovalores impede que as autofunções sejam globalmente definidas; $\lambda_k = k\omega$, constante em todo (p, q) apenas no caso do oscilador harmônico.

Esta expansão faz sentido, no entanto. As autofunções continuam a existir, mas como distribuições sobre as órbitas periódicas ou sobre os toros racionais no caso integrável. Uma vez que esta retificação seja feita, o tratamento exposto em Prigogine, e que de fato já vinha do trabalho de Koopman [35], fica consistente para o caso integrável. Restam ainda o caso dos sistemas misto e caótico, em que não existem variáveis de ação, constantes de movimento em involução que tornam a equação de Liouville resolúvel por separação de variáveis.

Procedemos agora a esta construção, adiantando que a sua essência está em concentrar nas órbitas periódicas a medida do espaço de fases.

4.1 Definições e conceitos preliminares

Seja $\Omega = \mathbf{R}^{2N}$ o espaço de fases de um sistema Hamiltoniano com N graus de liberdade, $H = \frac{p^2}{2} + V(q)$ sua função Hamiltoniana, com $V(q) \rightarrow \infty$ se $|q| \rightarrow \infty$. Desta última condição, decorre que as superfícies de energia $H = E$ são compactas. Supondo ainda que $V(q)$ tenha um mínimo global, as equações de Hamilton

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \qquad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \qquad (4.2)$$

possuem soluções globais, que podem ser estendidas ao infinito no tempo, para qualquer condição inicial (veja teorema 12.5 de [22]). Assumamos que o fluxo Hamiltoniano seja ergódico (caótico). O caso misto será discutido oportunamente.

Denotemos por $\omega(q_0, p_0; \cdot)$ a solução de (4.2) com condições iniciais (q_0, p_0) , isto é, $\omega(p_0, q_0; t) = (q(t), p(t))$. Seja ainda $\gamma(q, p) \subset \Omega$ a curva imagem da função ω , o traço da órbita passando por (q, p) . Se existe um tempo T tal que $\omega(q, p; T) = (q, p)$, então $\gamma(q, p)$ é chamada uma *órbita periódica* e o menor número positivo T é o *período* da órbita. Seja $l(q, p; t)$ o comprimento de arco de uma órbita, dado por

$$l(q, p, t) = \int_0^t \|\dot{\omega}(p, q; t')\| dt' , \quad (4.3)$$

em que $\dot{\omega}$ denota a derivada com respeito ao tempo e $\|\cdot\|$ é a norma Euclideana em $\mathbf{R}^{2N}$. O comprimento total de uma órbita periódica é $l(q, p; T)$, que denotaremos por $l(\gamma)$.

Um *espaço de medida* é uma terna $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$, em que Ω é um conjunto, $\mathcal{A}$ é uma σ -álgebra contida em $P(\Omega)$ (partes de Ω) e μ é uma medida sobre $\mathcal{A}$. Uma σ -álgebra é uma classe de conjuntos onde as operações de complementar, intersecção e união enumeráveis são fechadas, isto é, geram conjuntos que permanecem na classe. Uma medida é uma função de conjunto que atribui um valor real, que aqui será sempre positivo, a um conjunto.

Numa medida *sigma-finita*, vale a propriedade $\forall A \in \mathcal{A}$, existe uma coleção enumerável de conjuntos mensuráveis A_i , cada um com medida finita, e cuja união contém A : $A \subseteq \bigcup_{i=1}^{\infty} A_i$. Esta propriedade é necessária para que possamos fazer integrações por partes.

Um exemplo clássico de sigma-álgebra é a de Borel. Um espaço topológico (X, τ) é o par consistindo de um conjunto X e uma coleção de abertos, τ , contendo X e o vazio, fechada por união qualquer e intersecção finita. τ é chamada uma topologia de X . A sigma-álgebra de Borel é aquela gerada pela topologia.

Seja $\mathcal{A}$ a sigma-álgebra gerada pelos conjuntos de Borel de $\mathbf{R}^{2N}$ e os traços das órbitas periódicas. De fato, como as órbitas são conjuntos fechados, elas já são borelianos.

Para o caso não-integrável, definiremos a medida usando o fato de que numa superfície de energia, $H = E$, denotada por $\mathcal{E}$, as órbitas periódicas aparecem isoladamente. Seja χ_A a função característica de $A \in \mathcal{A}$

$$\chi_A(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \notin A \\ 1 & \text{se } x \in A \end{cases}$$

Se $A \in \mathcal{A}$ não é uma órbita periódica, seja $A_e = A \cap \mathcal{E}$ a interseção de A com uma superfície de energia. Os pedaços de órbitas periódicas em A_e serão denotados por $\gamma_{A_e}(q, p)$ e seus comprimentos por $l(\gamma_{A_e})$.

A seguinte é a definição mais importante desta seção:

Definição: μ é uma medida satisfazendo

$$\int \chi_\gamma d\mu = \begin{cases} 0 & \text{se } \forall t \neq 0 : \omega(q, p; t) \neq (q, p) \\ a(\gamma) & \text{se } \exists T \neq 0 : \omega(q, p; T) = (q, p) \end{cases} \quad (4.4)$$

em que $a(\gamma)$ é um peso positivo. Se $A \subset \Omega$ é um conjunto para o qual $E_1 \leq H(q, p) \leq E_2$, qualquer que seja $(q, p) \in A$,

$$\int \chi_A d\mu = \int_{E_1}^{E_2} \left\{ \sum_n a(\gamma(q_n, p_n)) \frac{l(\gamma_{nA_e})}{l(\gamma_n)} \right\} dE \quad (4.5)$$

em que (q_n, p_n) são arbitrários em cada órbita.

Medidas associadas ao espectro de operadores auto-adjuntos

O espectro de um operador auto-adjunto é um subconjunto da reta real. Qualquer medida na reta tem uma decomposição única em três partes

$$\mu = \mu_{pp} + \mu_{ac} + \mu_{sing} ,$$

em que μ_{pp} é uma medida puro ponto, μ_{ac} é absolutamente contínua com respeito à medida de Lebesgue e μ_{sing} é contínua e singular com respeito à medida de Lebesgue. As três partes são mutuamente singulares de modo que

$$L^2(\mathbf{R}, d\mu) = L^2(\mathbf{R}, d\mu_{pp}) \oplus L^2(\mathbf{R}, d\mu_{ac}) \oplus L^2(\mathbf{R}, d\mu_{sing}) .$$

As *medidas espectrais* $d\mu_\psi$ são aquelas construídas a partir das auto-funções ψ de um operador auto-adjunto A num espaço de Hilbert $\mathcal{H}$. Por exemplo, no caso do espectro do átomo de hidrogênio, na parte do contínuo temos uma medida absolutamente contínua, e na parte do espectro chamado ‘discreto’ (ligado) temos uma medida puro ponto.

Sendo A um operador auto-adjunto limitado¹ no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$, definimos

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{pp} &= \{\psi | \mu_\psi \text{ é puro ponto (ou pontual)}\} \\ \mathcal{H}_{ac} &= \{\psi | \mu_\psi \text{ é absolutamente contínua}\} \\ \mathcal{H}_{sing} &= \{\psi | \mu_\psi \text{ é contínua, mas singular}\}\end{aligned}$$

Segue que $\mathcal{H}_{pp}$, $\mathcal{H}_{ac}$ e $\mathcal{H}_{sing}$ são subspaços mutuamente ortogonais e invariantes sob a ação do operador A . Além disto

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{pp} \oplus \mathcal{H}_{ac} \oplus \mathcal{H}_{sing} .$$

Em correspondência, cada parte do espectro de um operador auto-adjunto, leva os mesmos nomes:

$$\begin{aligned}\sigma_{pp}(A) &= \{\lambda | \lambda \text{ é um autovalor de } A\} \\ \sigma_{cont}(A) &= \sigma(A \text{ restrito a } \mathcal{H}_{cont} \equiv \mathcal{H}_{ac} \oplus \mathcal{H}_{sing}) \\ \sigma_{ac}(A) &= \sigma(A \text{ restrito a } \mathcal{H}_{ac}) \\ \sigma_{sing}(A) &= \sigma(A \text{ restrito a } \mathcal{H}_{sing})\end{aligned}$$

¹ Usaremos esta definição também para o operador de Liouville, que não é limitado.

4.2 Conseqüências da medida de Dirac

A definição da medida μ é o começo do problema em sistemas dinâmicos caóticos.

Impomos a seguinte condição sobre a medida da união das órbitas periódicas numa superfície de energia $\mathcal{E}$:

$$\sum_n \int \chi_{\gamma_n} d\mu = \int_{\Omega} \delta(E - H) d^N q d^N p < \infty, \quad (4.6)$$

em que o índice n se reporta a uma ordem das órbitas fechadas. Isto implica que μ é sigma-finita, uma condição suficiente para que a regra de integração por partes seja válida [42]. Na eq.(4.6) o lado esquerdo contém uma série infinita. Como ela converge, o termo geral tende a zero quando $n \rightarrow \infty$.

Na verdade, a medida de cada órbita periódica tomada individualmente tende a zero, conforme vamos considerando mais e mais órbitas no lado esquerdo de (4.6). Isto é adequado e compatível com a definição de ergodicidade (veja, por exemplo, def. 3.3 do cap. 1 de [43]), em que os únicos conjuntos invariantes sob um fluxo ergódico têm medida nula ou 1. A propósito, este é o chamado *sentido de Cesaro* para a ergodicidade.

Este é um ponto delicado do formalismo, pois iremos fazer manipulações com os pesos $a(\gamma)$ como se fossem finitos, como logo adiante na normalização das autofunções do operador de Liouville. O procedimento que nos permite tratá-los como se fossem números é o seguinte.

Primeiramente consideramos uma ordem natural das órbitas periódicas. Podemos considerar a razão

$$b_k = \frac{T_k}{|2(\cosh \lambda_k T_k - 1)|},$$

em que T_k é o período da órbita e λ_k seu expoente de Lyapunov. É sabido (veja, por exemplo, [30]) que a soma $\sum_{k=1}^N b_k$ tem um comportamento assintótico definido, que é de crescimento proporcional ao N -ésimo período².

²De fato, a soma que cresce com o período conta as repetições das órbitas e assim $\sum_k b_k$ é limitada superiormente por este limite assintótico.

Portanto, podemos construir uma sequência de medidas $d\mu_N$, com N órbitas, com os pesos $a_k = a(\gamma_k)$ dados por

$$a_k = \text{constante} \frac{b_k}{\sum_{k=1}^N b_k} ,$$

em que a constante é dada pela área da superfície de energia, o lado direito da equação (4.6). Claramente, a ordem de importância das órbitas permanece a mesma, pois o raio de seus pesos a_k é o mesmo de b_k , que é finito mesmo para $N \rightarrow \infty$. $d\mu$ é portanto o limite de tais $d\mu_N$.

A extensão da idéia contida na equação (4.6), já contida na definição da seção anterior, é que cada subconjunto A_E da superfície de energia tenha, através desta medida de Dirac, a mesma medida que tem via medida de Liouville. Apesar de não convencional, a grande vantagem de se trabalhar com a medida de Dirac é que poderemos trabalhar com expansões em autofunções também em mecânica clássica. Além disto, aparece uma relação entre o espectro do operador de Liouville e os períodos das órbitas fechadas, que ora expomos.

Consideremos o anel de funções definidas em Ω a valores complexos, f , geradas pela união das funções infinitamente diferenciáveis com suporte compacto, $C_0^\infty(\Omega)$, e as funções obtidas pela restrição daquelas às órbitas periódicas:

$$f_\gamma(q, p) = f(q, p)\chi_\gamma .$$

O conjunto de distribuições assim obtido é um espaço vetorial, que denotaremos por $\mathcal{D}'$, que podem ser chamadas *variáveis dinâmicas distribucionais*, mas que continuaremos a chamar simplesmente de variáveis dinâmicas.

Evidentemente, se $f \in \mathcal{D}'$ é uma função mensurável³ no sentido usual, continua a ser com a medida $d\mu$. As funções restritas a órbitas são também mensuráveis. Denotamos, como é costume, a integral de uma função men-

³Para que uma função seja *mensurável*, basta que a imagem inversa, sob f , de um conjunto mensurável seja mensurável.

surável f com a medida $d\mu$ por

$$\int_{\Omega} f(q, p) d\mu .$$

Também é necessária uma reavaliação da derivada. O caso mais patológico é exatamente de uma distribuição, digamos χ_{γ} . Esta derivada é não nula se a órbita é periódica, pois a medida destas é não-nula. As regras usuais de derivação de distribuição se aplicam neste tratamento, porque vale a integração por partes [44]. Por exemplo, dado $g \in C_0^1$, temos

$$\int_{\Omega} \frac{d\chi_{\gamma}}{dq_1} g(q, p) d\mu = - \int_{\Omega} \chi_{\gamma} \frac{dg}{dq_1}(q, p) d\mu .$$

Estende-se este procedimento para derivação para qualquer função projetada f_{γ} . Se consideramos um conjunto de coordenadas definido localmente em torno de uma órbita periódica γ , o gradiente de uma função f_{γ} tem apenas uma componente não-nula, que é aquela ao longo da direção de $\omega(q, p; t)$ — a velocidade em cima da órbita.

Definimos o produto interno de f e g , duas variáveis dinâmicas, pela equação

$$\langle f, g \rangle \equiv \int_{\Omega} f(q, p) g(q, p) d\mu . \quad (4.7)$$

Seja $L^2(\Omega, d\mu)$ o conjunto de variáveis dinâmicas satisfazendo

$$\int_{\Omega} |f(q, p)|^2 d\mu < \infty .$$

Então $L^2(\Omega, d\mu)$ é completo, e portanto Hilbert [28]. Como as órbitas do fluxo Hamiltoniano estão sempre contidas num compacto, por exemplo $H \leq E$, em que E é a energia da órbita, este espaço contém as funções restritas às órbitas.

Até o momento, ocupamo-nos em descrever o espaço de Hilbert na mecânica clássica ou, melhor dizendo, nosso *modelo* de espaço de Hilbert.

Estamos agora prontos para estudar o operador de Liouville neste espaço. Definamos o operador de evolução U_t

$$(U_t f)(q, p) = f(\omega(q, p; t)) . \quad (4.8)$$

Para provar que U_t é unitário, o Teorema de Liouville, precisamos apenas notar que $d\mu$ é invariante sob o fluxo Hamiltoniano. Para tornar isto perfeitamente explícito, podemos escrever $d\mu$ em termos da medida usual multiplicada pelas funções delta de Dirac sobre as órbitas periódicas:

$$d\mu = \sum_k a(\gamma_k) \delta_{\gamma_k} d^N q d^N p .$$

Portanto, se $J(-t)$ é o jacobiano da transformação inversa induzida pelo fluxo, $(q, p) \rightarrow \omega(q, p; t)$, temos

$$\begin{aligned} \|U_t f\|^2 &= \int |f(\omega(q, p; t))|^2 d\mu \\ &= \sum_k a(\gamma_k) \int \delta_{\gamma_k} |f(\omega(q, p; t))|^2 d^N q d^N p \\ &= \sum_k a(\gamma_k) \int \delta_{\gamma_k} \det(J(-t)) |f(\omega(q, p; 0))|^2 d^N q d^N p \\ &= \sum_k a(\gamma_k) \int \delta_{\gamma_k} |f(q, p)|^2 d^N q d^N p \\ &= \|f\|^2 , \end{aligned}$$

em que na última igualdade usamos que δ_{γ_k} é invariante sobre o fluxo.

O gerador infinitesimal do operador unitário U_t é dado pelo parêntesis de Poisson

$$\frac{d(U_t f)}{dt} = \{H, f\} \equiv \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) .$$

O espectro do operador de Liouville

$$\mathcal{L}f = -i\{H, f\} \tag{4.9}$$

é obtido considerando-se as funções projetadas sobre as órbitas periódicas.

Sendo $f(t) = U_t f$, temos o problema de autovalores

$$-i \frac{df}{dt} = \mathcal{L}f = \lambda f . \tag{4.10}$$

Por inspeção, as autofunções normalizadas e os correspondentes autovalores são dados por

$$f_{kn}(q, p) = \frac{1}{\sqrt{a(\gamma_k)}} \exp(2\pi n i \tau / T_k) \chi_{\gamma_k} \quad \lambda_{kn} = \frac{2\pi n}{T_k}, \quad (4.11)$$

em que $\tau \equiv \tau(q, p)$ é dado implicitamente por $\omega(q_k, p_k; \tau) = (q, p)$ e (q_k, p_k) pode ser escolhido arbitrariamente sobre a órbita γ_k . n é um inteiro e T_k é o período de γ_k . A eq.(4.11) expressa o espectro puro ponto em termos das frequências, inversamente proporcionais ao período primitivo, do movimento caótico. E é o resultado principal deste capítulo.

Para provar que as autofunções da eq.(4.11) são todas as autofunções do problema basta notar que elas são uma base para as funções projetadas sobre as órbitas periódicas. Por outro lado, se alguma função contínua, em Ω ou sobre uma superfície de energia $\mathcal{E}$, é uma autofunção, ela deve ser constante. Pois f tem de ser da forma

$$f(q, p) = e^{i\lambda\tau} f(q_0, p_0)$$

e calculando $U_{2\pi/\lambda}^j f(q, p)$ para $j = 1, 2, \dots$ e (q, p) fora de qualquer órbita periódica, obtemos um conjunto de pontos denso na superfície de energia onde f tem o mesmo valor. Este resultado foi obtido por Avez [45], para um sistema dinâmico geral sobre um toro.

É sabido que, para um fluxo caótico (ergódico), existem órbitas periódicas com períodos tão grandes quanto se queira. Portanto, existe uma seqüência de autovalores λ_{kn} convergindo para zero. Consequentemente, o espectro puro ponto do operador de Liouville, em uma dada superfície de energia, é denso sobre a reta, pela propriedade arquimedecana dos reais (para qualquer $x \in \mathbf{R}$, existem $n, m \in \mathbf{N}$ tais que $nx > m$, donde dado λ pequeno o suficiente $n\lambda < x < (m+1)\lambda$). Como o espectro essencial, σ_{ess} , é fechado, temos que ele é toda a reta real. Logo, σ , por conter σ_{ess} e ser um subconjunto da reta real, forçosamente é a reta real. Nos resultados de Sinai [37], o espectro essencial é puramente absolutamente contínuo. Discutiremos

esta aparente contradição na próxima seção, mostrando que ela é devida a estarmos considerando operadores de Liouville distintos, que não são unitariamente equivalentes.

O conjunto de autofunções dados na eq.(4.11) é uma base para o espaço de Hilbert que construímos. Uma expansão de uma função $f \in L^2(\Omega, d\mu)$ é obtida usualmente, com os coeficientes dados por $\langle f, f_{nk} \rangle$. A expansão é única porque elas são únicas para os dois tipos de função do anel (que gera o espaço vetorial): funções projetadas ou funções contínuas. Para as primeiras, a expansão é uma análise de Fourier sobre uma (ou várias) órbitas periódicas, e esta análise é única porque a base de Fourier é completa sobre cada órbita. Para uma função contínua arbitrária f , consideremos a sua projeção sobre a união de órbitas periódicas de uma certa superfície de energia $\mathcal{E}$, $f_{\mathcal{E}}$. A expansão de $f_{\mathcal{E}}$ é única, como já vimos. Esta é a expansão de f , pois a função $g = f - f_{\mathcal{E}}$ é a função nula (de fato, uma das representantes da classe de equivalência da função nula).

No caso de o fluxo não ser caótico, mas misto, a mesma construção é válida, uma vez que as órbitas periódicas continuam aparecendo isoladamente numa superfície de energia fixa. Os pesos $a(\gamma)$ têm uma peculiaridade se a energia é o parâmetro de caoticidade, como no caso do potencial NELSON. De fato, se uma órbita γ sofre uma bifurcação numa energia E^* , como os pesos são dependentes da energia, uma descontinuidade ocorre em $a(\gamma)$ nesta energia E^* para balancear a existência de duas órbitas para $E > E^*$.

Já para o caso integrável, as órbitas periódicas aparecem em famílias a (pelo menos) N -parâmetros. Analogamente, a medida de Dirac atribui pesos positivos aos toros racionais, enquanto os toros irracionais detêm medida nula - por não conterem órbitas periódicas. Como já mencionamos, as expressões para as autofunções e autovalores neste caso foram determinadas por Koopman [35] e apareceram em [41], do qual extraímos a relação para os autovalores

$$\lambda_{\{n\}} = n_1\omega_1 + \cdots + n_N\omega_N ,$$

em que ω_i , $i = 1, \dots, N$ são as frequências de cada direção independente do N -toro. Uma diferença fundamental no espectro do caso integrável é que, como as frequências ω_i têm um fator comum ω_0 , isto é, elas são racionalmente dependentes, o ínfimo de $\lambda_{\{n\}}$ é positivo. Neste caso portanto, o espectro é discreto e puro ponto.

4.3 Propriedades do espectro caótico

A relação entre as propriedades espectrais de um sistema dinâmico Hamiltoniano e a natureza do fluxo também apresenta características inusitadas neste tratamento. As aparentes contradições podem ser resumidas nos teoremas ergódicos de von Neumann, cujas formulações aparecem por exemplo no apêndice 3 de [46]. A propriedade de um sistema Hamiltoniano ser *mixing*, por exemplo,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \nu(\phi_t(A) \cap B) = \nu(A) \cdot \nu(B) ,$$

em que ν é a medida, ϕ_t é o fluxo e A, B são conjuntos mensuráveis, implica que o espectro da restrição do operador unitário correspondente, U_t , ao subespaço ortogonal às funções constantes, é puramente absolutamente contínuo.

Como vimos, o espectro do operador de Liouville aqui considerado, para cada energia, é a reta real. Podemos decompor o espectro em duas componentes, σ_{pp} , cujos elementos são dados na eq.(4.11), e seu complemento, que é certamente não-vazio. Temos portanto uma componente contínua do espectro, mas estamos deliberadamente atribuindo uma medida nula a ela. Isto pôde ser feito porque estivemos interessados nas expansões de funções contínuas, em que o espectro pontual se mostrou bastante.

Concluindo, a descrição que obtivemos para o espectro do operador de Liouville (análoga à do operador unitário correspondente U_t) é a seguinte: $\sigma = \sigma_{pp} \cup \sigma_{cont}$, em que $\sigma_{cont} = \sigma_{ac} \cup \sigma_{sing}$. Mas a medida espectral

$$d\mu_{cont} = d\mu_{ac} \oplus d\mu_{sing}$$

é nula, enquanto $d\mu_{pp} = d\mu$. Na decomposição do espaço de Hilbert, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{pp} \oplus \mathcal{H}_{ac} \oplus \mathcal{H}_{sing}$, em que $\oplus$ denota a soma direta, os subespaços que correspondem aos espectros absolutamente contínuo e singular são vazios. Muito embora $d\mu$ seja uma medida singular, ela corresponde à parte pontual do espectro.

A discrepância entre as implicações dos teoremas de von Neumann e a descrição acima advém justamente de que a medida de Dirac não é absolutamente contínua com respeito à medida de Lebesgue, ou mesmo à medida de Lebesgue sobre a superfície de energia (também chamada medida de Liouville). As medidas ν e $d\mu$ não têm os mesmos conjuntos de medida nula, bastando lembrar do complemento da união das órbitas periódicas. Assim, são dois operadores unitários distintos sendo tratados, aquele que aparece no enunciado do teorema de von Neumann e o que tratamos aqui. Eles não são unitariamente equivalentes.

Com este estudo, vimos que não aparecem inconsistências elementares nesta formulação de espaços de Hilbert. Além disto, é preciso bastante cuidado com a terminologia de espectro para evitarmos confusões.

Capítulo 5

Conclusões

Nesta tese, vimos que um sistema de interesse que tem sua energia dissipada ao longo do tempo pode ser imaginado acoplado a um sistema caótico. Vários experimentos numéricos foram feitos, usando como sistema de interesse uma partícula em uma dimensão sujeita a um potencial quártico. Além da dissipação na média microcanônica do movimento da partícula de interesse, a não linearidade de seu potencial faz surgir um potencial dependente do tempo, cuja amplitude é às vezes maior que a energia dissipada.

No limite de acoplamento fraco, obtivemos uma equação que resume os efeitos do reservatório caótico sobre o sistema de interesse:

$$M_z \langle \ddot{z} \rangle + \left\langle \frac{\partial V}{\partial z} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial V_r}{\partial z} \right\rangle = \mathcal{F}(z) , \quad (5.1)$$

a equação (2.34). Na equação acima, $V = V(z)$ é o potencial da partícula de interesse. A diferença

$$\left\langle \frac{\partial V(z)}{\partial z} \right\rangle \neq \frac{\partial V(\langle z \rangle)}{\partial \langle z \rangle} ,$$

que ocorre para $V'(z)$ não-linear, é responsável por um potencial dependente do tempo na dinâmica. O potencial V_r é um potencial de renormalização, que depende do acoplamento e do reservatório caótico a que acoplamos. Nos

casos aqui mostrados, este termo tem efeito muito maior que o potencial adiabático e $\mathcal{F}(z)$.

O termo do lado direito da eq.(2.34), $\mathcal{F}(z)$, é o funcional dado na eq.(2.32):

$$\mathcal{F}(z) = \frac{2\gamma^2}{\pi} \int_0^\infty S(\omega) \int_0^t \sin \omega(t-t') z(t') dt' , \quad (5.2)$$

em que γ é basicamente o módulo da constante de acoplamento. $S(\omega)$ é a transformada de Fourier da autocorrelação da variável do sistema caótico usada para acoplarmos o sistema de interesse. Na equação acima, usamos escrevemos $\mathcal{F}(z)$ somente em termos de $S(\omega)$, mas na verdade, este termo é igual, para frequências positivas, à parte imaginária da transformada de Fourier da susceptibilidade dinâmica retardada do banho, $\chi''(\omega)$. O termo da convolução é formalmente igual àquele obtido no tratamento de Caldeira e Leggett [25], com o reservatório de osciladores harmônicos.

As propriedades mais importantes da densidade espectral $S(\omega)$ para um sistema caótico conservativo são as seguintes:

- $S(0) \neq 0$ por causa das órbitas periódicas longas, de período tão grande quanto se queira, que são genéricas num sistema caótico;
- $S(0)$ é responsável por um efeito de memória na dinâmica do sistema de interesse;
- para um sistema de dois graus de liberdade regular, $S(\omega)$ tem picos localizados em torno das frequências das órbitas mais importantes;
- neste último caso, se o sistema de interesse é muito mais lento que o sistema caótico, o efeito de $\mathcal{F}$ é anulado pela média microcanônica;
- mesmo no regime caótico, $S(\omega)$ tem valores altos em torno de frequências de certas órbitas periódicas, possivelmente as menos instáveis.

As propriedades da densidade espectral, o seu efeito na dinâmica do sistema de interesse e o paralelo com o tratamento de Caldeira e Leggett da

dissipação são obtidos graças a uma formulação de espaços de Hilbert em mecânica clássica. Esta teoria permite uma linearização das equações de movimento do sistema caótico, contanto que as equações de Hamilton deste possuam soluções globais no tempo (qualquer que seja a condição inicial).

A idéia fundamental da formulação do espaço de Hilbert é atribuir às órbitas periódicas do fluxo Hamiltoniano a medida no espaço de fases. Lembrando que as órbitas periódicas são variedades de dimensão um imersas na superfície de energia, cuja dimensão é 3 no caso, uma medida com deltas de Dirac sobre as órbitas é introduzida. Através dela, o operador de Liouville clássico possui autofunções não triviais, associadas ao traço das órbitas periódicas. Os autovalores são proporcionais ao inverso dos períodos das órbitas, isto é, suas frequências. Assim o espectro do operador de Liouville é transposto para a densidade espectral acima mencionada.

A medida de Dirac, $d\mu$, introduzida no capítulo 3 e formalizada no capítulo 4, permite uma releitura do princípio da uniformidade, formulado por Hannay e Ozorio de Almeida [5]. O enunciado aqui obtido é o seguinte

$$\int \mathbb{1} \, d\mu = \Sigma \, , \quad (5.3)$$

em que Σ é a área da superfície de energia

$$\Sigma(E) = \int \delta(E - H) dq \, d\vec{p}$$

e $\mathbb{1}$ é a função característica do conjunto de órbitas periódicas da superfície de energia $H = E$.

A interpretação imediata da equação (5.3) é que podemos medir através das órbitas periódicas da mesma forma que através da medida de Liouville $\delta(E - H) \, dq \, d\vec{p}$. Isto é bastante simples. A sofisticação escondida na definição da medida $d\mu$ (veja capítulo 3) está nos pesos que se devem atribuir a cada órbita periódica. O resultado não trivial é que a soma destes pesos, basicamente as intensidades das órbitas, tem um comportamento assintótico genérico.

Apêndice A

O integrador simplético

Existem diversos métodos numéricos de integração de equações diferenciais ordinárias. Eles se caracterizam pela ordem k com sua acurácia sendo definida localmente em função do tamanho do intervalo da variável independente, usualmente o tempo. Assim, para um passo de integração h , o erro nas variáveis é da ordem de h^{k+1} , por exemplo para integradores da família Runge-Kutta.

Se evoluímos um sistema que tem quantidades conservadas, como a energia total num sistema hamiltoniano, sabemos que a solução exata, ainda que desconhecida, do sistema de equações diferenciais por ela gerado levaria a um mapa simplético a partir de condições iniciais até qualquer estado final. Entretanto, uma propriedade indesejada dos integradores Runge-Kutta é de não serem simpléticos exatamente, manifestada no determinante do Jacobiano da evolução para um passo de integração ser diferente de um, o que significa que o sistema é artificialmente excitado ou amortecido durante a integração. Em muitas aplicações esta propriedade fica patente depois de muitas iterações, levando a resultados espúrios.

Assim motivados, Forest e Ruth [18] definiram os *integradores simpléticos*, esquemas de integração numérica para sistemas hamiltonianos que conservam

a 2-forma $dp \wedge dq$ exatamente, e portanto a energia, de modo que

$$(q(0), p(0)) \rightarrow (q(t), p(t))$$

é uma transformação canônica.

Suponha que queiramos resolver as equações de Hamilton

$$\frac{d\mathbf{z}}{dt} = [\mathbf{z}, \mathcal{H}] , \quad (\text{A.1})$$

em que $\mathbf{z}$ é um ponto no espaço de fase $2n$ -dimensional.

Reescrevendo a equação acima com a definição de operador de Lie relacionado a $\mathcal{H}$, temos

$$\frac{d\mathbf{z}}{dt} = - : \mathcal{H} : \mathbf{z}$$

em que $: \mathcal{H} : f \equiv [\mathcal{H}, f]$. Vamos determinar um mapa simplético $M(t)$ que atuem sobre funções das variáveis dinâmicas da seguinte forma:

$$g(z(t)) = M(t)g(z_0) . \quad (\text{A.2})$$

Como g não tem nenhuma dependência temporal explícita, ele obedece à relação

$$\frac{dg}{dt} = [g, \mathcal{H}] ,$$

donde vem para M :

$$\begin{aligned} \frac{dM}{dt}g(z_0) &= [M g(z_0), \mathcal{H}(M z_0; t)] \\ &= [M g(z_0), M \mathcal{H}(z_0; t)] \\ &= M[g(z_0), \mathcal{H}(z_0; t)] \\ &= -M : \mathcal{H}(z_0; t) : g(z_0) , \end{aligned}$$

em que usamos que o parêntesis de Poisson é invariante sob transformações simpléticas. Como g é arbitrária, obtivemos

$$\frac{dM}{dt} = -M : \mathcal{H}(z_0; t) : . \quad (\text{A.3})$$

Lembremos que M atua sobre funções de z_0 , de acordo com (A.2).

Para a hamiltoniana $\mathcal{H}$ independente do tempo, podemos resolver a equação acima formalmente, escrevendo

$$M(t) = \exp(t : \mathcal{H}(z_0) :). \quad (\text{A.4})$$

Em geral, não podemos calcular explicitamente $M(t)z_0$ qualquer que seja $\mathcal{H}$. Seria de pouca utilidade esta fórmula se não pudéssemos usá-la como ponte para aproximações: a integração simplética consiste em substituírmos $M(t)$ por um produto de transformações simpléticas que aproximam $M(t)$ até uma certa ordem e de modo que cada fator possa ser exatamente e explicitamente calculado sobre uma condição inicial z_0 .

Um caso particular de integradores simpléticos para uma hamiltoniana do tipo

$$\mathcal{H} = T(p) + \mathcal{V}(q)$$

se baseia em decompor a exponencial de $\mathcal{H}$ em um produto de exponenciais de T e $\mathcal{V}$, que geram transformações simpléticas explicitamente computáveis. Assim por exemplo

$$e^{t\mathcal{H}} \approx e^{tT} e^{t\mathcal{V}}. \quad (\text{A.5})$$

Sabemos que a diferença entre os lados direito e esquerdo da equação acima é da ordem de t^2 através da fórmula de Campbell-Baker-Hausdorff (BCII):

$$\exp(X)\exp(Y) = \exp(Z),$$

em que

$$Z = X + Y + [X, Y] + \frac{1}{12}([X, [X, Y]] + [Y, [Y, X]]) + \frac{1}{24}[X, [Y, [X, Y]]] + \dots$$

pois claramente T e $\mathcal{V}$ não comutam. A relação acima vale em geral para qualquer decomposição de $\mathcal{H}$.

Escrevendo $\mathcal{H} = A+B$, o problema de determinar um integrador simplético de ordem n se resume portanto a encontrar um conjunto de números reais

$(c_1, \dots, c_k)$ e $(d_1, \dots, d_k)$ tal que a diferença entre a função $e^{t(A+B)}$ e o produto de funções exponenciais

$$\exp(c_1 t A) \exp(d_1 t B) \times \dots \times \exp(c_k t A) \exp(d_k t B)$$

é da ordem de t^{n+1} , ou seja, para os quais a igualdade

$$\exp[t(A+B)] = \prod_{i=1}^k \exp(c_i t A) \exp(d_i t B) + O(t^{n+1}) \quad (\text{A.6})$$

seja satisfeita.

Yoshida resolveu este problema exata e aproximadamente para $n = 6$ e $n = 8$ em [19]. De seu trabalho usamos o integrador de sexta ordem aproximado, que tem um número de avaliações de exponenciais menor do que o exato ($k = 8$ para o integrador aproximado e $k = 10$ para o exato para completo detalhamento, ver [19]).

É importante salientar que o erro $O(t^{n+1})$ se aplica tanto às variáveis $\mathbf{z}$ e quanto às constantes de movimento, mesmo para $n = 2$. Isto é particularmente conveniente para o problema que estamos interessados, em que a energia total deve ser conservada.

Apêndice B

Proliferação de órbitas

Para o caso integrável, o número de órbitas $N(T)$ até período T pode ser calculado facilmente trabalhando no espaço de ângulos. A densidade de órbitas $\rho(T)$ é dada pela derivada

$$\rho(T) = \frac{dN}{dT} . \quad (\text{B.1})$$

Este desenvolvimento é devido a Ozorio de Almeida [47].

Cada ‘ponto’ na camada de energia, representada no espaço de ações, é um toro com frequências $\omega_j = \frac{\partial H}{\partial I_j}$. Considere uma vizinhança dI , que contém infinitos toros ressonantes, onde as frequências ω_j são racionalmente dependentes. Ele corresponde a uma vizinhança em frequências: $d\vec{\omega}$.

No espaço dos ângulos, temos

$$\theta_j = T\omega_j .$$

Para cada $\vec{\omega}$ fixo, a evolução temporal é dada por uma reta passando pela origem. Considerando todos os toros em dI , varremos, no tempo T , um cone no espaço dos ângulos de volume

$$\delta V = \frac{\pi(T\vec{\omega})^2}{2\pi} \delta\phi \quad (\text{B.2})$$

em que $\delta\phi$ está mostrado na figura abaixo.

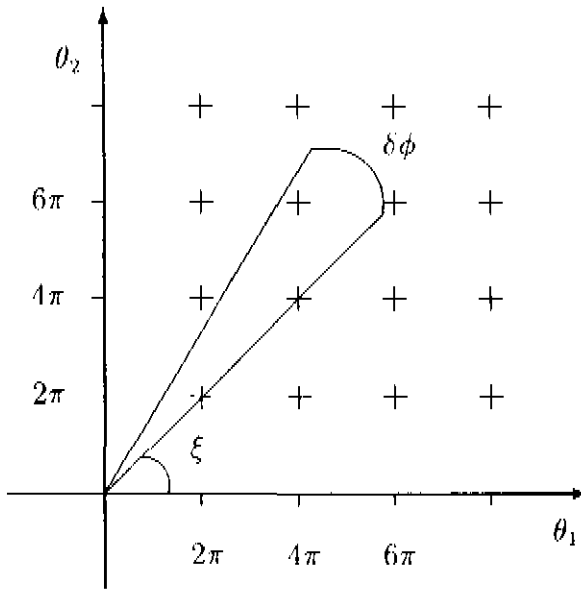


Figura B.1: O espaço dos ângulos. As órbitas periódicas acontecem quando $\theta \pmod{2\pi} = 0$.

Da figura, vemos claramente que o elemento $\delta\phi$ cresce com o raio, este proporcional a T , $r = |\vec{\omega}|T$. E temos também

$$\begin{aligned} d\theta_1 &= -r \sin \xi d\xi & d\theta_2 &= r \cos \xi d\xi \\ \delta\phi &= r |d(\cos \xi, \sin \xi)| \\ \cos \xi &= \frac{\omega_1}{|\vec{\omega}|} & \sin \xi &= \frac{\omega_2}{|\vec{\omega}|} \end{aligned}$$

Como as órbitas periódicas primitivas estão dispostas regularmente no espaço dos ângulos, com densidade $\frac{1}{4\pi^2}$, o número de órbitas periódicas no setor circular até o período T é dado por

$$\begin{aligned} \delta N(T) &= \frac{r^3}{8\pi^2} \left| d \left(\frac{\omega_1}{\sqrt{\omega_1^2 + \omega_2^2}}, \frac{\omega_2}{\sqrt{\omega_1^2 + \omega_2^2}} \right) \right| \\ &= \frac{T^3}{8\pi^2} |\vec{\omega}| |\vec{\omega} \wedge d\vec{\omega}| . \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Integrando na ação I_1 , que pode ser tomada como parâmetro, temos

$$N(T) = \frac{T^3}{8\pi^2} \int |\vec{\omega}| |\vec{\omega} \wedge d\vec{\omega}| dI_1 . \quad (\text{B.4})$$

O comportamento de $\rho(T)$ no caso integrável é portanto dado por

$$\rho(T) \propto T^2 . \quad (\text{B.5})$$

Em [27], obtemos

$$\rho(T) = 2aT^2(\vec{\omega} \cdot \vec{l}) \left| \frac{dE}{dT} \right| ,$$

partindo do fato de que o número de órbitas periódicas cresce na forma $N(S) = aS^2$, em que S é a ação das órbitas. Este resultado para $N(S)$ é extraído de [34].

Apêndice C

Questões diversas

Este apêndice trata de algumas questões levantadas durante o seminário de defesa desta tese e que não puderam ser colocadas no texto principal.

Lembrando que, no regime regular, os impulsos devidos ao acoplamento com o potencial NELSON ficam diminuídos por causa da limitação em energia, seria o caso de estudarmos o acoplamento do sistema lento a um sistema regular ou integrável onde isto não acontece. A intenção é eliminar a hipótese de que o decréscimo da energia E_z , se deveu à amplitude dos impulsos do sistema rápido e não ao regime caótico do seu fluxo. Para o contexto desta questão, veja a figura 2.12 e também o segundo parágrafo abaixo da figura 2.8, à página 41.

Apesar de esta questão já ter sido parcialmente respondida quando estudamos a sequência de bilhares caóticos, fazemos aqui um estudo numérico, evidentemente análogo ao que vimos fazendo, de um bilhar circular. Havíamos mostrado com a sequência de bilhares que a maior caoticidade provoca maior dissipação, uma vez que a perturbação era semelhante em cada bilhar. O parâmetro de semelhança usado para compararmos as perturbações foi o valor inicial das autocorrelações.

Mostramos abaixo os resultados para a autocorrelação e a projeção do movimento lento, quando acoplado a um bilhar circular de raio $r = 7.54$,

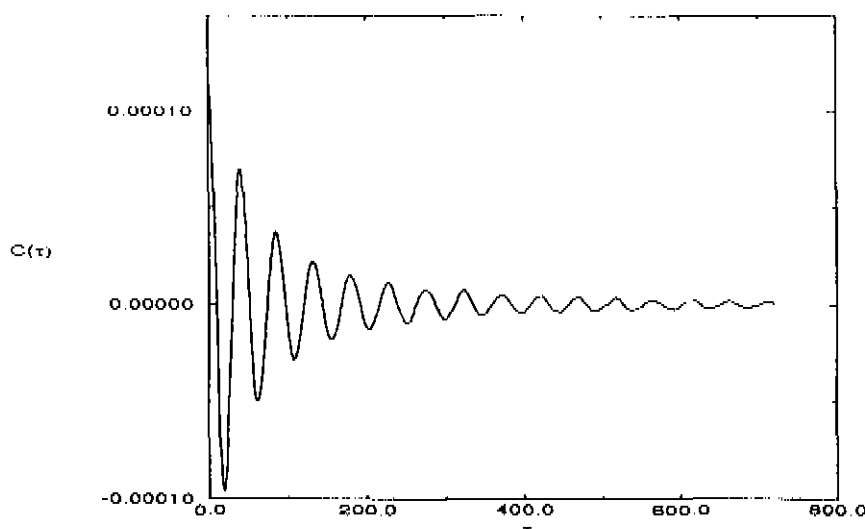


Figura C.1: Correlação para o bilhar circular. Número de condições iniciais: 12999.

esta última superposta à resultante do acoplamento com o bilhar 7. Este bilhar circular pode ser visto como limite do achatamento, na direção x , do bilhar de Bunimovich. As constantes de acoplamento são iguais àsquelas que usamos para o bilhar 7, $a = 1.0544 \times 10^{-3}$ e $b = 2.636 \times 10^{-3}$, mas o efeito é menor, ainda que apenas para tempo grande.

É interessante notar que a autocorrelação apresenta um decréscimo exponencial, apesar de o bilhar circular ser integrável. Se há uma cauda oscilante no gráfico acima, sua amplitude é muito pequena comparada ao que poderíamos esperar tendo em mente o gráfico da autocorrelação no caso do NELSON regular. Ocorre que o bilhar circular tem uma sequência de órbitas fechadas cujos traços são os polígonos regulares inscritos no círculo. Além destes, as órbitas podem se fechar depois de 2, 3, n voltas no círculo. Possivelmente isto crie uma superposição de cossenos, no espírito da equação (3.59), que gera este decaimento. No caso do NELSON, as frequências próximas, que aparecem na transformada de Fourier do gráfico mostrado na figura 2.11, correspondem às duas órbitas periódicas naquela energia, $E \approx 0.04$ [16].

Outra questão relevante é sobre o que acontece com a evolução do movimento médio se tomamos a condição inicial do sistema lento na origem, isto é, $(z_0, p_{z0}) = (0, 0)$. Se este é um sorvedouro para o movimento médio, dado

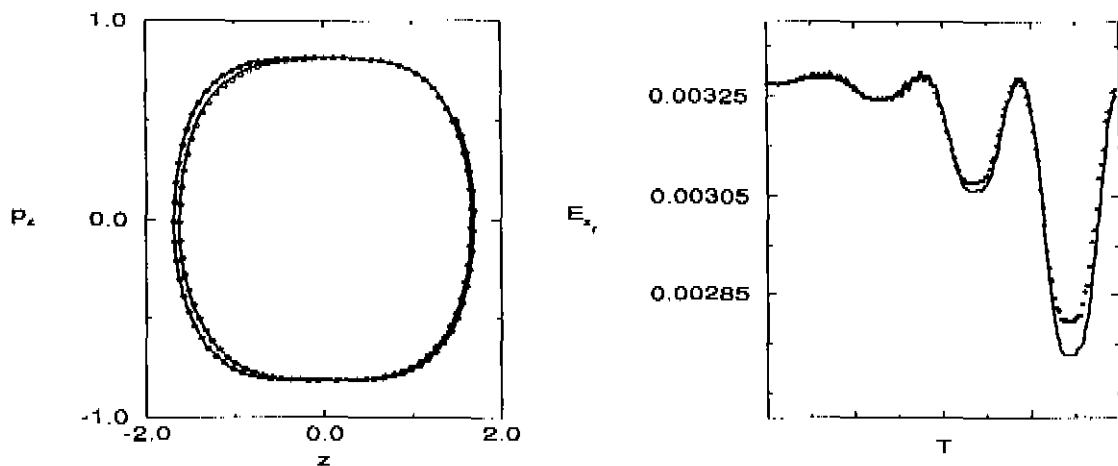


Figura C.2: Análogo à figura (2.17). Evolução média do sistema lento quando acoplado com o bilhar circular de raio 7.54, marcada com pontos. Superpostos nas figuras correspondentes estão os gráficos da evolução média do sistema lento quando acoplado ao bilhar 7, marcada com um linha cheia.

pela equação (2.34), ele deve ser um ponto fixo. Exatamente isto é o que mostramos na figura C.3. Observe-se que a energia $|E_{zr}| < 1e-7$ significa zero, do ponto de vista da integração numérica. Como não temos um período de referência, evoluímos por 1000 unidades de tempo, que é da mesma ordem do período das outras condições iniciais.

Na mesma direção, seria o caso de estendermos no tempo os gráficos mostrados nas figuras 2.4, em vez de 1.8 período, para nos certificarmos de que o ponto realmente tende para a origem. Na figura C.4, mostramos a o movimento médio para a condição inicial $(z_0, p_{z0}) = (-1.5, 0.5)$ evoluída para $2.8T$, em que $T = 1176$ denota o período do sistema lento desacoplado.

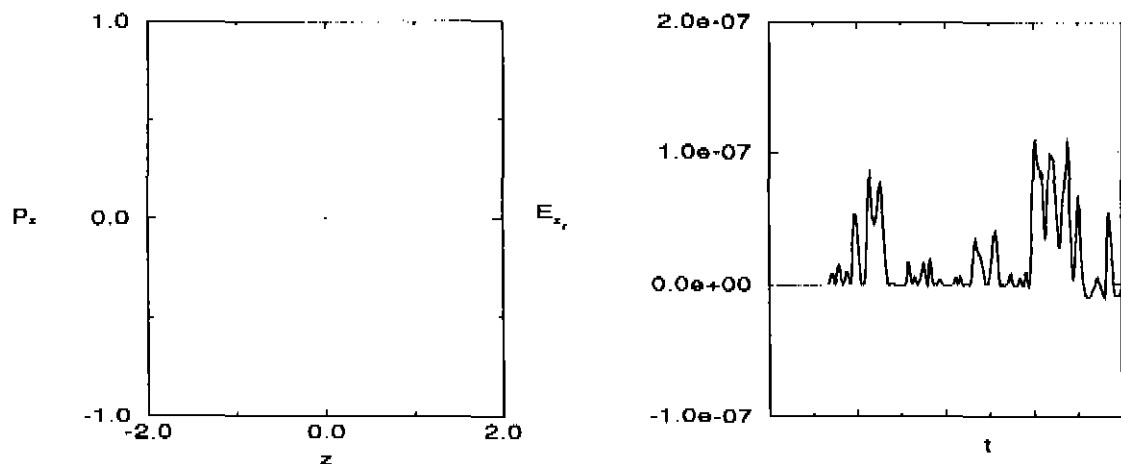
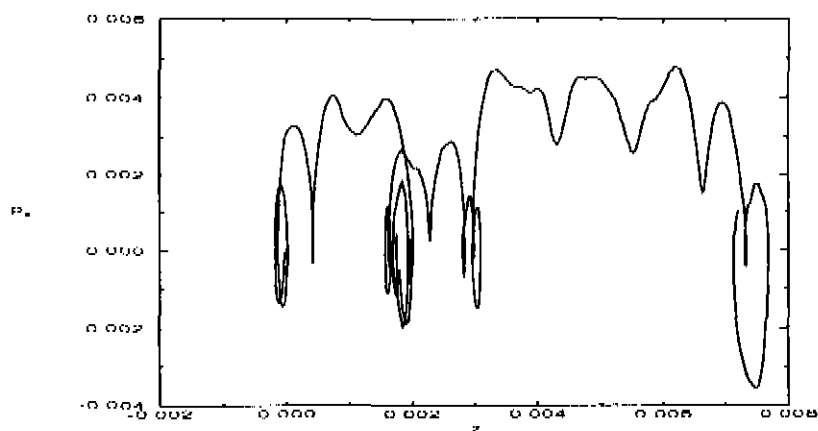


Figura C.3: Análogo à figura 2.4. O tempo total de evolução é 1000 unidades de tempo. Partimos da condição inicial $(z_0, p_{z0}) = (0, 0)$. A resolução da escala, no gráfico à esquerda, é a mesma das figuras habituais. Observe que $|E_{zr}| < 1e - 7$ durante quase todo o tempo t . Abaixo mostramos a projeção em detalhe, mas não identificamos nenhum comportamento.



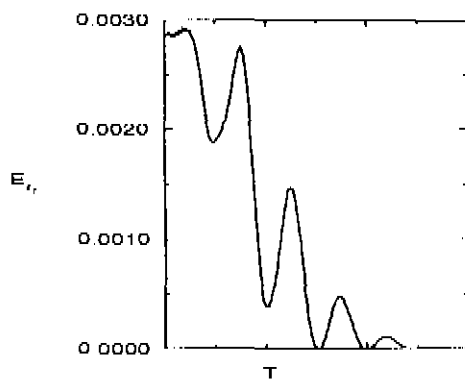
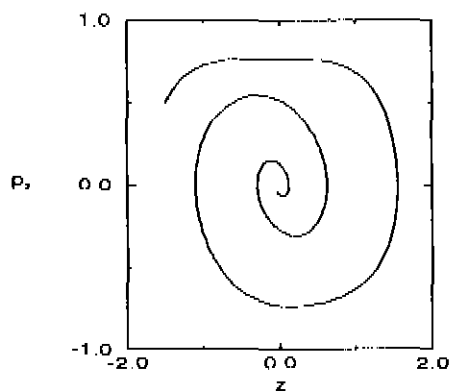


Figura C.4: Análogo à figura 2.4, gráfico tracejado, exceto que o tempo total de evolução é $2.8T$.

Como já mencionado no texto principal, esquematizamos agora a dedução de $\chi''(\omega)$ para a autocorrelação no caso do NELSON caótico:

$$C_x(\tau) = \sigma^2 e^{-\alpha|\tau|} \cos \omega_0 \tau .$$

Calculando a transformada de Hilbert de $C_x(\tau)$, temos

$$\begin{aligned} \chi(t) &= \frac{\sigma^2}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\alpha|t'|} \cos \omega_0 t'}{t' - t} dt' \\ &= \frac{\sigma^2}{2\pi} \left\{ \int_0^{\infty} \frac{e^{-\alpha t'} \cos \omega_0 t'}{t' - t} dt' - \int_0^{\infty} \frac{e^{-\alpha t'} \cos \omega_0 t'}{t' + t} dt' \right\} \\ &= \frac{\sigma^2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{t e^{-\alpha t'} \cos \omega_0 t'}{t'^2 - t^2} dt' \end{aligned}$$

Tomando a parte imaginária da transformada de Fourier do resultado, vemos que de fato

$$\chi''(\omega) = S_x(\omega) , \quad (\text{C.1})$$

para $\omega > 0$. Na equação acima, usamos que (veja 3.723.10 de [48])

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{t' \operatorname{sen} \omega t'}{t^2 - t'^2} dt' = -\pi \cos \omega t \operatorname{sinal}(\omega) ,$$

em que, evidentemente,

$$\operatorname{sinal}(\omega) = \begin{cases} 1 & \text{se } \omega > 0 \\ 0 & \text{se } \omega = 0 \\ -1 & \text{se } \omega < 0 \end{cases}$$

Bibliografia

- [1] A.O. Caldeira and A.J. Leggett. Quantum Tunnelling in a Dissipative System. *Annals of Physics*, 149:374, 1983.
- [2] M. Wilkinson. Dissipation by identical oscillators. *Journal of Physics A*, 23:3603, 1990.
- [3] M.V. Berry and J.M. Robbins. Chaotic classical and half-classical adiabatic reactions: geometric magnetism and deterministic friction. *Proc. R. Soc. London A*, 442:659, 1993.
- [4] Edward Ott. Goodness of ergodic adiabatic invariants. *Phys. Rev. Lett.*, 42:1628, 1979.
- [5] J.H.Hannay and A.M.Ozorio de Almeida. Periodic orbits and a correlation function for the semiclassical density of states. *Journal of Physics A*, 17:3429, 1984.
- [6] R. Fürth, editor. *Investigations on the theory of the Brownian Movement*. Dover Pub., Inc., New York, 1956.
- [7] A. Einstein. On the movement of small particles suspended in a stationary liquid demanded by the molecular-kinetic theory of heat. In R. Fürth, editor, *Investigations on the theory of the Brownian Movement*, pages pp.1-18. Dover Pub., Inc., 1956.

- [8] Ya.G. Sinai. Dynamical systems with elastic reflections. *Russian Math. Surveys*, 25:137–189, 1970.
- [9] Nelson Wax, editor. *Selected papers on Noise and Stochastic processes*. Dover Pub., Inc., New York, 1954.
- [10] R. Brown, E. Ott and C. Grebogi. The goodness of ergodic adiabatic invariants. *J. Stat. Phys.*, 49:511, 1987.
- [11] A.O. Caldeira. *Alguns aspectos da dinâmica quântica de uma partícula Browniana*. Notas de Física do IFGW-Unicamp, Campinas, 1994.
- [12] M.V. Berry. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 392:45–57, 1984.
- [13] J.M. Robbins and M.V. Berry. The geometric phase for chaotic systems. *Proc. R. Soc. Lon. A*, 436:631–661, 1992.
- [14] V. Iório. *EDP, um curso de graduação*. IMPA – CNPq, 1^a edition, 1991.
- [15] C. Jarzynski. Multiple-time-scale approach to ergodic adiabatic systems: another look. *Phys. Rev. Let.*, 71:839, 1993.
- [16] M. Barranger and K.T.R. Davies. Periodic trajectories for a two-dimensional nonintegrable Hamiltonian. *Annals of Physics*, 177:330–358, 1987.
- [17] E.T. Jaynes. Where do we stand on maximum entropy. In R.D. Levine and M. Tribus, editors, *The Maximum Entropy Formalism*, page 16. MIT Press, 1979.
- [18] E. Forest and R.D. Ruth. Fourth-order symplectic integration. *Physica D*, 43:105, 1990.
- [19] H. Yoshida. Construction of higher order symplectic integrators. *Phys. Letters A*, 150:262, 1990.

- [20] S.D. Prado. Quebra de simetrias em sistemas hamiltonianos: efeitos clássicos e quânticos. Master's thesis, IFGW-Unicamp, 1992.
- [21] Ruggero Maria Santilli. *Foundations of Theoretical Mechanics*. Springer Verlag, New York, 1978.
- [22] V.I. Arnold. *Equações diferenciais ordinárias*. Ed. Mir, Moscou, 1985.
- [23] E.M. Lifshitz L. Landau and L.P.Pitaevskii. *Statistical Physics*. Pergamon Press, Oxford, 1980.
- [24] R.L. Stratonovich. *Topics in the Theory of Random Noise*. Gordon and Breach, Science Pub. Inc., New York, 1963.
- [25] A.O. Caldeira and A.J. Leggett. Path Integral approach to quantum Brownian Motion. *Physica*, 121A:587, 1983.
- [26] T.O. de Carvalho and M.A.M. de Aguiar. Classical chaos as an environment for dissipation. *to appear in Phys. Rev. Let.*, 1996.
- [27] T.O. de Carvalho and M.A.M. de Aguiar. Eigenfunctions of the Liouville operator, periodic orbits and the principle of uniformity. *submitted to J. Phys. A*, 1995.
- [28] Michael Reed and Barry Simon. *Methods of Modern Mathematical Physics*, volume 1 e 2. Academic Press, Inc., New York, 1975.
- [29] Kurt Gottfried. *Quantum Mechanics: Fundamentals*. W.A. Benjamin, Inc., Amsterdam, 1966.
- [30] M.V. Berry. Some quantum-to-classical asymptotics. In A. Voros M.-J. Giannoni and J. Zinn-Justin, editors, *Chaos et Physique Quantique*, page p.251. Elsevier Science Pub., Amsterdam, 1991.
- [31] A.M. Ozorio de Almeida and J.H. Hannay. Resonant periodic orbits and the semiclassical energy spectrum. *Journal of Physics A*, 20:5873, 1987.

- [32] Michael Spivak. *Calculus on Manifolds*. W.A.Benjamin, Inc., Amsterdam, 1965.
- [33] M.V. Berry and J.P. Keating. A rule for quantizing chaos? *J.Phys. A:Math.Gen.*, 23:4839–4849, 1990.
- [34] Martin C. Gutzwiller. *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*. Springer-Verlag, New York, 1990.
- [35] B.O. Koopman. Hamiltonian systems and transformations in Hilbert spaces. *Proc. Nat. Acad. Sci. (USA)*, 17:315–318, 1931.
- [36] P.R. Halmos and J.von Neumann. Operator methods in classical mechanics, ii. *Ann. Math.*, 43:332–350, 1942.
- [37] Ya.G. Sinai. Dynamical systems with countably-multiple Lebesgue spectrum i. *Amer. Math. Soc. Transl. (2)*, 39:83–110, 1964.
- [38] I.M. Gel'fand and V.S. Fomin. Geodesic flows on manifolds of constant negative curvature. *Amer. Math. Soc. Transl. (2)*, 1:49–65, 1955.
- [39] D. Anosov and Ya.G. Sinai. Some smooth ergodic systems. *Russian Math. Surveys*, 22:103–167, 1967.
- [40] T.O. de Carvalho. Note on a Dirac measure for the Hamiltonian flow. *submitted to J.Phys. A – Letter to the Editor*, 1995.
- [41] I. Prigogine. *Non-Equilibrium Statistical Mechanics (chap.1)*. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1962.
- [42] Pedro J. Fernandez. *Medida e Integração*. IMPA – CNPq, Rio de Janeiro, 1976.
- [43] Ya.G. Sinai. *Dynamical Systems II*. Springer-Verlag, Berlin, 1989.

- [44] L. Schwartz. *Théorie des Distributions*. Hermann & Cie., Éditeurs, Paris, 1950.
- [45] A. Avez. Spectre discret des systèmes ergodiques classiques. *C. R. Acad. Sc. Paris*, 264 (A):49–52, 1967.
- [46] P. Lochak and C. Meunier. *Multiphase averaging for classical systems*. Springer, New York, 1988.
- [47] A.M. Ozorio de Almeida. *comunicação pessoal*, 1995.
- [48] I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik. *Table of Integrals Series and Products*. Academic Press, Inc., New York, 1980.