



Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Instituto de Física

Programa de Pós Graduação em Física

**Mecânica Estatística em Sistemas
com Interações de Longo Alcance:
Estados Estacionários e Equilíbrio**

Tarcísio Nunes Teles

Tese de Doutorado

Porto Alegre
Julho de 2012

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Instituto de Física

Tarcísio Nunes Teles

Mecânica Estatística em Sistemas com Interações de Longo Alcance: Estados Estacionários e Equilíbrio

Trabalho apresentado ao Programa de Pós Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor em Ciências.

Orientador: *Yan Levin*
Co-orientador: *Renato Pakter*

Porto Alegre
Julho de 2012

À minha querida esposa.

Agradecimentos

Acredito que no desenvolvimento de uma tese este seja o momento mais difícil. As contribuições que recebemos durante essa jornada são demasiadamente vastas e vão muito além da pesquisa em si. As chances de se cometer alguma injustiça com um ou outro são grandes mas vamos lá.

Inicialmente sou grato a Deus pelo fôlego de vida e por saber que sem ele nada do que foi feito seria ao menos possível. Sou grato aos irmãos da Maranata, principalmente os que encontrei em Porto Alegre, que me acolheram em um ambiente familiar e que me ajudaram em todo instante, os nomes são tantos que, para não cometer nenhuma injustiça, prefiro guardar em particular. Sou grato aos professores Yan Levin e Renato Pakter pela orientação nesse trabalho, pelas discussões sempre proveitosas e pela agilidade com que, juntos, sempre resolvemos os pontos críticos da tese. Gostaria de deixar um agradecimento ao professor Rizzato pela simpatia com que sempre me recebeu e pela disposição que sempre mostrou em discutir assuntos de Física. Aos colegas de sala também deixo meus agradecimentos, em especial a Fernanda, pela gentileza prestada principalmente nesse último ano de doutorado, a quem desejo grande sucesso na carreira.

Sou grato à minha família, em especial aos meus pais, pelo incentivo e principalmente investimento prestados desde os primeiros passos rumo a este doutoramento. A minha mãe por acreditar, fielmente, que somente pela educação conseguimos algum progresso, ao meu irmão pela assistência prestada à família em todo esse período e a meu pai pela forma simples e extremamente feliz com que sempre levou a vida, um abraço especial.

Por fim, mas de maneira nenhuma por último à minha, querida, esposa e companheira Lurdinha que muitas vezes me fez companhia nas madrugadas adentro, na grande parte delas sem uma razão para isso, apenas para me fazer companhia, a minha querida um agradecimento muito especial.

Ao CNPQ pelo apoio financeiro sem o qual o desenvolvimento do trabalho seria extremamente mais difícil.

Resumo

Desde os trabalhos de Clausius, Boltzmann e Gibbs, sabe-se que partículas que interagem através de potenciais de curto alcance alcançam, após um processo de relaxação, o estado final estacionário que corresponde ao equilíbrio termodinâmico [1]. Embora nenhuma prova exata exista para isso, na prática, verifica-se que os sistemas não-integráveis com uma energia fixa e um número finito de partículas (*ensemble* microcanônico, por exemplo) sempre relaxam para um estado estacionário que só depende de quantidades globais conservadas pela dinâmica: energia, *momentum* e *momentum* angular. Este estado estacionário corresponde ao estado de equilíbrio termodinâmico e não depende das especificidades da distribuição inicial de partículas.

Este cenário muda drasticamente quando a interação entre as partículas passa a ser de longo alcance [2]. A descrição estatística e termodinâmica desses sistemas ainda é objeto de estudo. Contudo, o que se sabe é que esses sistemas têm como propriedade fundamental o fato de que, no limite termodinâmico o tempo de colisão diverge e o equilíbrio termodinâmico nunca é atingido [3].

Nesse trabalho analisamos do ponto de vista teórico e por simulação de dinâmica molecular o estado estacionário atingido por sistemas auto-gravitantes em uma, duas e três dimensões e plasmas não-neutros na dinâmica de um feixe de partículas carregadas. Analisamos ainda um modelo com transição de fases para o estado fora do equilíbrio (HMF). Em todos os casos a teoria proposta na tese mostrou-se consistente com os simulações numéricas empregadas.

Palavras-chave: Interações de longo alcance, Sistemas auto-gravitantes, Plasmas não-neutros, Estados estacionários, Equação de Boltzmann, Equação de Vlasov, Não-equilíbrio.

Abstract

Since the work of Clausius, Boltzmann and Gibbs, it is known that particles interacting by a short-range potential, after a relaxation process, reach a final stationary state that corresponds to thermodynamic equilibrium. Although no exact proof exists, in practice non-integrable systems with fixed energy and a finite number of particles (i.e., microcanonical ensemble) always relax to a stationary state that depends only on global quantities conserved by the dynamics: energy, momentum and angular momentum. This stationary state corresponds to the state of thermodynamic equilibrium and does not depend on the specifics of the initial particle distribution.

This scenario changes drastically when the interaction between particles is long-ranged [2]. The statistical and thermodynamic description of these systems is still an object of study. However, a fundamental property of these systems is the fact that, in the thermodynamic limit, the collision time diverges and thermodynamic equilibrium is never achieved [3].

In this thesis we analyse, from a theoretical point of view and using molecular dynamics simulations, the stationary state achieved by self-gravitating systems in one, two and three dimensions and non-neutral plasmas in the dynamics of charged particle beams. We also analyse a model with out-of-equilibrium phase transitions (HMF). In all these cases, the theory proposed in this thesis is shown to be consistent with the numerical simulations applied.

Keywords: Long range interactions, Self-gravitating system, Non-neutral Plasmas, Dynamical processes, Stationary states, Boltzmann equation, Vlasov equation, Non-equilibrium.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Termodinâmica	1
1.2	Mecânica Estatística	4
1.3	Sistemas com Interações de Longo Alcance	6
1.3.1	Equilíbrio termodinâmico	9
1.3.1.1	Extensividade	9
1.3.1.2	Aditividade	9
1.3.1.3	Relaxação Lenta	10
1.3.2	Limite termodinâmico	10
1.4	Metodologia e Plano de Tese	11
2	Modelagem do Problema	13
2.1	Teoria Cinética	13
2.2	Equação de Vlasov	15
2.2.1	Propriedades da equação de Vlasov	16
2.2.2	Teorias Estatísticas para dinâmica de Vlasov	18
2.2.2.1	Relaxação Violenta	18
2.2.2.2	Distribuição Núcleo-Halo	21
2.3	Equação de Poisson	22
3	Gravitação	23
3.1	Problema em 3D	23
3.2	Problema em 1D	24
3.2.1	Equilíbrio Termodinâmico: N finito	27
3.2.2	Limite Termodinâmico: N infinito	27
3.2.2.1	Relaxação Violenta	28
3.2.2.2	Equação de Envelope	28
3.2.2.3	Modelo de Partícula Teste	31
3.2.2.4	Distribuição Núcleo-Halo	33
3.3	Problema em 2D	35
3.3.1	Equilíbrio Termodinâmico: N finito	37
3.3.2	Limite Termodinâmico: N infinito	38
3.3.2.1	Relaxação Violenta	39
3.3.2.2	Equação de Envelope	41
3.3.2.3	Modelo de Partícula Teste	42

3.3.2.4	Distribuição Núcleo-Halo	43
3.3.3	Tempo de Relaxação	45
3.4	Revisitando o Problema em 3D	47
3.5	Conclusões	48
4	Plasmas Não-Neutros	49
4.1	Modelo	50
4.2	Equação de Envelope	53
4.3	Condições Iniciais	54
4.4	Equilíbrio Termodinâmico: N_b Finito	55
4.5	Limite Termodinâmico: N_b Infinito	56
4.5.1	Relaxação Violenta	56
4.5.2	Modelo de Partícula Teste	57
4.5.3	Distribuição Núcleo-Halo	58
4.5.4	Conservação da Norma	59
4.5.5	Conservação da Energia	60
4.6	Resultados	62
4.6.1	Crescimento de Emitância	62
4.6.2	Partículas do Halo	62
4.7	Tempo de Relaxação	64
4.8	Conclusões	65
5	Revisitando o HMF	67
5.1	Equilíbrio Termodinâmico: N Finito	69
5.2	Limite Termodinâmico: N Infinito	70
5.3	Equação de Envelope	70
5.4	Conclusões	71
A	Dinâmica Molecular	77
A.1	Simulação de Campo Médio	77
A.2	Método de Integração	78
B	Cálculo Numérico	79
B.1	Método I	79
B.2	Método II	81
C	Teorema Virial	83

Lista de Figuras

- 2.1 Evolução, em termo das variáveis de ação-ângulo (ε, ϕ) da função de distribuição na dinâmica de Vlasov: A função de distribuição filamenta-se no espaço de fase preservando o volume inicial (figura retirada de [67]). 17
- 2.2 Distribuição inicial, macroscópica e microscópica, para a função de distribuição de um nível η com $d = 1$. 19
- 2.3 Distribuição final, macroscópica e microscópica, para a função de distribuição de um nível η com $d = 1$. 19
- 3.1 Predição teórica da distribuição de Maxwell-Boltzmann para o estado de equilíbrio no sistema em uma dimensão (3.20) e (3.21). 28
- 3.2 Distribuição em posição (a) e velocidade (b) para o sistema inicialmente na condições virial $\mathcal{R}_0 = 1$. Os pontos são resultados da simulação dinâmica para o hamiltoniano dado por (3.8) e a linha cheia o resultado previsto pela teoria da relaxação violenta (2.31). 29
- 3.3 Espaço de fase inicial (a, b) e final ($t=1000$) (c, d) de $N = 10^4$ partículas distribuídas inicialmente com $\mathcal{R}_0 = 1$ (a) e $\mathcal{R}_0 = 2,5$ (b). O estado estacionário é notavelmente distinto se o sistema desenvolve ou não oscilações. Em particular nota-se uma separação de fases com a formação de um núcleo e o halo. 30
- 3.4 Evolução do envelope para $\mathcal{R}_0 = 0,5$. A linha contínua representa a previsão teórica da (3.29) e os pontos o resultado da simulação de N -corpos. 31
- 3.5 Seções de Poincaré para $\mathcal{R}_0 \approx 1$ (a) e $\mathcal{R}_0 = 0,5$ (b). Verifica-se em (a) a formação de uma única ilha de ressonância enquanto em (b) a formação de duas ilhas de ressonância. 32
- 3.6 Espaço de fase para um sistema inicialmente com $\mathcal{R}_0 = 0,5$ em $t=7$ (a) e a seção de Poincaré obtida pela dinâmica de partículas teste para $\mathcal{R}_0 = 0,5$ (b). Percebe-se que o método das partículas teste permite determinar a máxima energia ϵ_h que uma partícula na dinâmica real de N -corpos pode obter. Nesse caso em particular $\epsilon_h = |x_h|$ sendo x_h a máxima posição atingida pela partícula teste. 32

- 3.7 Distribuições finais em posição (a) e velocidade (b), para distribuição inicial do tipo (water-bag) com $\mathcal{R}_0 = 0,5$, em $t=1000 \tau_D$ e (c) e (d) são as distribuições finais para o caso em que $\mathcal{R}_0 = 2,5$. As linhas pontilhadas representam as distribuições iniciais, os pontos os resultados das simulações de N -corpos e, a linha cheia representa o resultado previsto pela teoria (2.32). 35
- 3.8 Distribuição em posição (a) e em velocidade (b) para um sistema com $\mathcal{E}_0 = -0,0433673$. A linha cheia corresponde a predição teórica obtida usando a função de distribuição (4.25) e os pontos são resultado da simulação para $N = 10000$ partículas. 39
- 3.9 Distribuição em posição (a) e velocidade (b) para um sistema que satisfaz inicialmente à condição virial. A linha contínua representa os resultado previsto pela teoria da relaxação violenta (2.31) enquanto que os pontos são resultados da simulação dinâmica para $N = 10000$ partículas no tempo $t = 1000$. 40
- 3.10 Distribuição em posição (a) para um sistema auto-gravitante com distribuição inicial próxima da condição virial, $\mathcal{R}_0 = 0,91$; a linha contínua representa a previsão teórica da teoria da relaxação violenta Eq. (2.31) enquanto que os pontos são resultados da simulação dinâmica de $N = 10000$ partículas. 40
- 3.11 Evolução do envelope de acordo com a aproximação dada pela eq. 3.61 (linha contínua) e de acordo com a simulação de N -corpos (pontos) para $\mathcal{R}_0 = 1,05$. Percebe-se um bom acordo especialmente para tempos curtos. 42
- 3.12 Seções de Poincaré para os casos em que $\mathcal{R}_0 \approx 1$ (a) e $\mathcal{R}_0 = 0,95$ (b). Verifica-se em (a) a formação de uma única ilha de ressonância enquanto que em (b) a formação de duas ilhas de ressonância. 43
- 3.13 Seção de Poincaré para partículas teste em (a) e espaço de fase em $t=2000$ (b) para o sistema inicialmente com $\mathcal{R}_0 = 0,9$. Através da dinâmica das partículas teste determinamos a máxima energia ϵ_h que uma partícula no sistema pode atingir. Nesse caso em particular, $\epsilon_h = \ln(r_h)$ sendo r_h a máxima posição atingida pela partícula teste. 44
- 3.14 Distribuição em posição (a) e velocidade (b) para um sistema com $\mathcal{R}_0 = 0,75$. A linha cheia corresponde à predição teórica obtida usando a função de distribuição núcleo-halo (2.32), e os pontos são resultados da dinâmica molecular com $N = 10000$ partículas. 46
- 3.15 (a) $\zeta(t)$ para diferentes número de partículas no sistema. Na região com zoom (a) mostramos o sistema indo para o estado tipo núcleo-halo após um tempo $t \approx 2000\tau_D^{2D}$. Quando o tempo é escalado por τ_\times todos os dados em (a) caem sobre uma curva universal (b). 47
- 3.16 Seções de Poincaré para os casos em que $\mathcal{R}_0 \approx 1$ (a) e $\mathcal{R}_0 = 0,97$ (b) para o caso tridimensional. Verifica-se em (a) a formação de uma única ilha de ressonância enquanto que em (b) a formação de duas ilhas de ressonância. 48

- 4.1 Feixe de partículas carregadas com raio característico r_b propagando-se ao longo da direção longitudinal \hat{z} com velocidade constante V_b . As partículas são confinadas por um campo magnético $\mathbf{B}^{ext} = B_0\hat{z}$ sendo o feixe isolado do meio externo através de uma parede cilíndrica condutora localizada em r_w . 50
- 4.2 Mudança de referenciais: “O” representa o referencial do laboratório enquanto “O’” o referencial de Larmor. 52
- 4.3 (a) Distribuição inicial no espaço de fase como normalização $\eta = \pi^{-2}$. 55
- 4.4 Distribuição em posição (a) e velocidade (b) para um sistema com $\mathcal{E}_0 = 1,597$. A linha cheia corresponde à predição teórica obtida usando a função de distribuição (MB) na equação de Poisson (4.25) e os pontos são resultado da simulação para $N = 1000$ partículas evoluindo no tempo segundo o hamiltoniano (4.11). Utilizamos nesse caso um integrador simplético de quarta ordem com passo de tempo constante de 10^{-2} [160]. 56
- 4.5 Densidade de número de partículas em posição (a) e velocidade (b) para um sistema na condição virial $\mu_0 = 1$ onde $K^* = 1$ e $r_w = 4$. A linha cheia corresponde à predição teórica obtida usando a função de distribuição oriunda da teoria da relaxação violenta (2.31) e os pontos são resultado da simulação para $N_b = 50000$ partículas evoluindo no tempo segundo o hamiltoniano (4.15). Utilizamos nesse caso o integrador tipo Runge-Kutta de quinta ordem com precisão fixa de modo a garantir um erro relativo na energia menor que 10^{-8} [161]. 57
- 4.6 Seção de Poincaré para partículas teste (a) e (b) espaço de fase na simulação de N -corpos (4.15) em $t = 200$ para uma distribuição inicial com $\mu_0 = 1,5$ e $K^* = 1$. O método das partículas teste permite determinar a máxima posição atingida no espaço de fase por uma partícula na dinâmica completa de N -corpos, r_h , e por consequência o cálculo da máxima energia ϵ_h que uma partícula pode atingir. Nesse caso $\epsilon_h = \frac{r_h^2}{2} - \ln\left(\frac{r_h}{r_w}\right)$. 58
- 4.7 Regiões no espaço de fase utilizadas na resolução da Eq. (4.9). 59
- 4.8 Distribuição em posição para um feixe inicialmente fora do equilíbrio com $\mu_0 = 1,5$. Os pontos são resultados da simulação e as linhas pontilhadas representam a distribuição inicial. Em (a) temos uma distribuição inicial uniforme (4.19) com $K^* = 1$, em (b) uma distribuição inicial uniforme com $K^* = 0,1$ e, (c) uma distribuição inicial completamente gaussiana (4.50) com $K^* = 1$. As linhas cheias representam a previsão teórica para uma distribuição inicialmente uniforme. Percebe-se que no caso (c) a distribuição não é tão bem descrita pela teoria como nos dois casos anteriores. Isso advém do fato que a distribuição inicial tem mais de um nível e que, portanto, a distribuição final para o núcleo deve contemplar a preservação de todos os níveis de acordo com a dinâmica de Vlasov. 63

- 4.9 Crescimento na emitância do feixe, ε , em termos do número virial inicial μ_0 obtidos pela teoria (linha cheia) e por meio da simulação numérica (símbolos) para $K^* = 0, 1$ em (a) e $K^* = 1$ em (b). Os símbolos correspondem a diferentes distribuições iniciais: uniforme (círculo), semi-gaussiano (quadrado) e, gaussiano (diamantes) enquanto que a linha pontilhada representa o resultado previsto pela Eq. (4.49). Se o cálculo da energia for feito exatamente (4.45) a predição teórica fica ainda melhor. 64
- 4.10 Crescimento na emitância do feixe ε em termos do número virial inicial μ_0 obtidos pela teoria (linhas cheia e pontilhada), por meio da simulação numérica (símbolos) para $K^* = 1$. Os símbolos correspondem a diferentes distribuições iniciais: uniforme (círculo), semi-gaussiano (quadrado) e, gaussiano (diamantes) enquanto que os pontos com barras de erro representam o resultado experimental obtido em [149]. 65
- 4.11 Fração de partículas no halo (4.53) como função do descasamento inicial (μ_0). 65
- 4.12 (a) $\zeta(t)$ para diferentes números de partículas no sistema. Quando o tempo dinâmico é escalado com τ_x todos os pontos em (a) caem sobre uma curva universal (b). 66
- 5.1 Magnetização para o estado de equilíbrio no HMF. Os pontos são resultados da simulação numérica de acordo com (5.2) para $N = 1000$ partículas. A linha cheia corresponde à predição teórica da equação (5.6). 69
- 5.2 Diagrama de fases para o HMF obtido via simulações de dinâmica molecular. A linha cheia é a linha da transição de fase de primeira ordem separando as fases paramagnética e ferromagnética obtida via simulação de N -corpos de (5.2). A curva pontilhada é a condição virial generalizada (5.11) e os quadrados representam a magnetização no estado estacionário obtido pela (2.31) na solução das equações (5.4). 71
- 5.3 Figura retirada de [163] onde mostra-se equivocadamente no diagrama de fases do qSS um ponto tricrítico localizado onde $(U; M_0) \approx (0, 6075; 0, 165)$. (5.2) com $N = 1000$ partículas. 72
- 5.4 Figura retirada de [167] onde mostra-se a transição de fases correta de primeira ordem para o estado fora do equilíbrio; os pontos são resultado da simulação de N -corpos (5.2) com $N = 1000$ partículas e a linha representa a transição obtida pela teoria núcleo-halo (2.32) em (5.4) para $M_0 = 0, 4$. 72
- 5.5 Figura retirada de [167] distribuição final em ângulo (c) e velocidades (d) segundo a teoria núcleo-halo (2.32). Os pontos são resultado da simulação dinâmica segundo (5.2) com $N = 10000$ partículas. 73

Introdução

Pode-se afirmar sem dúvidas que, as ferramentas da Mecânica Estatística (ME) desempenham um papel fundamental na descrição dos sistemas físicos ditos complexos. Tal afirmativa é corroborada pela possibilidade oferecida pela ME de conexão entre o mundo microscópico, geralmente governado pelas leis da Mecânica, com o mundo macroscópico quase sempre bem descrito pelas leis da Termodinâmica. Outrossim, nos últimos 50 anos, uma série de estudos apontam que essas ferramentas não seriam suficientes na descrição de sistemas cujos constituintes interagem por forças de longo alcance. É nesse ponto, em particular, que encontra-se o objetivo maior deste trabalho. Seria possível entender do ponto de vista estatístico e/ou termodinâmico os sistemas cujas interações entre os seus constituintes são de longo alcance? ¹. Tal resposta pode esclarecer um conjunto de fenômenos tanto clássicos como quânticos que ainda permanecem em aberto.

A evidência das interações de longo alcance na natureza é demasiadamente vasta indo, desde os sistemas auto-gravitantes [4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15], aos modelos de vórtices em hidrodinâmica [16, 17, 18, 19], plasmas não-neutros (como nos feixes de partículas carregadas) [20, 21, 22], laser de elétrons livres [23, 24], modelos quânticos para interações de spin [25], e outros modelos de brinquedo [2].

Em geral para esses sistemas os resultados da ME de equilíbrio mostram-se de certa forma surpreendentes, principalmente por induzir a conclusões que parecem violar leis da Termodinâmica bem como da ME de equilíbrio em si. No primeiro caso o ponto principal seria a possibilidade de existência de calor específico negativo e consequente violação da lei zero da Termodinâmica [26, 27, 28] enquanto que no segundo um ponto de especial atenção estaria ligado à possibilidade de inequivalência entre os conjuntos (ensembles) estatísticos.

Dessa maneira antes de atacar o problema central da tese vamos fazer uma breve revisão do desenvolvimento histórico de ambas teorias com o intuito de apontar os fundamentos teóricos e experimentais dos conceitos que trataremos no decurso do trabalho.

1.1 Termodinâmica

Inicialmente diríamos que a precisão dos resultados faz da Termodinâmica uma das teorias físicas com maior prestígio no ambiente científico. Tal afirmativa é corroborada pela

¹Definiremos mais adiante e de maneira mais rigorosa o que entendemos por interação de longo alcance mas por hora entendamos com a interação cujo alcance é comparável em magnitude ao tamanho do sistema físico em questão.

famosa frase de Einstein ao dizer que,

“...Therefore the deep impression which classical thermodynamics made upon me. It is the only physical theory of universal content concerning which I am convinced that, within the framework of the applicability of its basic concepts, it will never be overthrown” (A. Einstein, 1946).

Ainda que passível de uma construção rigorosa do ponto de vista matemático [29] a Termodinâmica inicialmente desenvolveu-se sob um olhar essencialmente fenomenológico ou experimental. Se por consequência de um período de efusão industrial ou não, o certo é que desde os trabalhos do físico germânico Otto von Guericke (1602-1680) sobre a formação de vácuo rompia-se o conceito aristotélico de “horror ao vácuo” e abria-se um leque de possibilidades no estudo da estrutura da matéria.

Motivados talvez por esse experimento os físicos ingleses Robert Boyle (1627 - 1691) e Robert Hooke (1635 - 1703), ao construírem uma bomba de ar, notaram que a pressão de um gás e o volume por ele ocupado eram grandezas inversamente proporcionais. Surgia assim umas das primeiras relações experimentais relacionada aos gases ideais (Lei de Boyle). Os resultados de Boyle influenciariam David Papin (1647 - 1712), físico francês, a desenvolver em 1679 uma versão rudimentar da moderna e popularmente conhecida panela de pressão. O dispositivo conhecido como marmitta de Papin viria a influenciar vários engenheiros da época a construir os mais diversos tipos de máquinas a vapor. Dentre estes, podemos destacar o engenheiro e inventor escocês James Watt (1736 - 1819) que conseguiria aumentar sobremaneira a eficiência de tais máquinas térmicas.

As bases da Termodinâmica surgiram por fim em 1824 com o físico francês Nicolas Léonard Sadi Carnot (1796 - 1832) quando no seu trabalho *“Reflections on the Motive Power of Fire”* abordou, dentre outros conceitos, o problema da eficiência das máquinas térmicas, sob um olhar essencialmente teórico

“In the fall of caloric, motive power evidently increases with the difference of temperature between the warm and cold bodies, but we do not know whether it is proportional to this difference” (Carnot, 1860)

Mais do que imaginava talvez, Carnot estabelecia a base de um dos conceitos que ainda hoje é motivo de grande discussão no ambiente científico, o conceito de entropia [30, 31, 32, 33].

Por fim, o trabalho em 1850 do físico germânico Rudolf Julius Emanuel Clausius (1822 - 1888) em conjunto com o físico inglês William Thomson (Lord Kelvin) (1824 - 1907) e com o físico escocês William John Macquorn Rankine (1820 - 1872) estabeleceu oficialmente a Termodinâmica ao definir seus principais postulados. O primeiro,

“In all cases where work is produced by heat, a quantity of heat proportional to the work done is consumed; and inversely, by the expenditure of a like quantity of work, the same amount of heat may be produced” (Clausius, 1867) [34]

e o segundo ao afirmar que

“...heat cannot of itself pass from a colder to a warmer body” (Clausius, 1867) [34] .

A grande contribuição de Clausius estaria em definir a entropia de um sistema termodinâmico como uma quantidade macroscópica de natureza tão fundamental quanto a energia ².

“...I propose to call the magnitude how the entropy of body ... as similar as possible to the word energy; for the two magnitudes to be denoted by these words are so nearly allied in their physical meanings...” (Clausius, 1867) [34]

De maneira não muito rigorosa, ressaltaremos aqui sob o ponto de vista termodinâmico o conceito de equilíbrio, para um tratamento mais rigoroso ver [35, 36, 37].

- O estado de equilíbrio termodinâmico define uma quantidade macroscópica T (temperatura) e inclui além do equilíbrio térmico o equilíbrio mecânico.
- O estado de equilíbrio termodinâmico é completamente descrito por funções de estado $\Phi(X_i, \dots, X_N; x_i, \dots, x_N) = 0$, sendo X_i e x_i quantidades extensivas e intensivas respectivamente. O conceito de extensividade estaria relacionado com a dependência, ou independência no caso das grandezas intensivas, com o tamanho do sistema por exemplo.
- O estado de equilíbrio termodinâmico não depende do estado inicial do sistema.
- As grandezas extensivas do sistema são funções homogêneas $f(X) = \lambda^{-p} f(\lambda^p X)$ de ordem p , sendo λ uma quantidade positiva.
- A entropia S do sistema e a energia interna U além de serem funções homogêneas são grandezas aditivas sendo que a entropia tende a um máximo enquanto a energia tende a um mínimo no estado de equilíbrio termodinâmico

Ainda que já relacionado com uma versão estatística da Termodinâmica, não poderíamos deixar de citar o trabalho do físico escocês James Clerk Maxwell (1831 - 1879) e do físico austríaco Ludwig Eduard Boltzmann (1844 - 1906). Ambos trabalharam no campo da teoria cinética dos gases no intuito de dar uma interpretação microscópica para os resultados da Termodinâmica, principalmente ao conceito de entropia. Maxwell inclusive viria em 1866 a demonstrar qual a distribuição de velocidades das moléculas de um gás ideal contido em um recipiente quando no equilíbrio termodinâmico.

Por outro lado, a interpretação da segunda lei do ponto de vista microscópico viria com Boltzmann ao derivar em 1872 a equação que leva seu nome,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{p} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}, \quad (1.1)$$

²Já no século XX completando os postulados fundamentais da Termodinâmica moderna surgiria a terceira lei com os trabalhos de Walther Hermann Nernst (1864—1941) ao estabelecer que a entropia de um sistema em $T = 0$ deveria ser finita ou nula.

onde $f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ é a função de distribuição reduzida de uma partícula que expressa a densidade da probabilidade de se encontrar uma partícula em uma posição \mathbf{q} com momento \mathbf{p} em um dado instante de tempo t sujeita a um potencial de interação $\psi(\mathbf{q})$. O termo do lado direito da equação seria uma medida das colisões moleculares que teria por função conduzir o sistema para uma distribuição de equilíbrio f_{eq} .

Boltzmann no desenvolvimento desse trabalho introduziu a ideia de caos molecular e demonstrou o conhecido teorema-H ao mostrar que uma função $H = \int f \ln f \, d\mathbf{q} \, d\mathbf{p}$ seria tal que

$$\frac{dH}{dt} \leq 0. \quad (1.2)$$

Dessa maneira, uma grandeza definida como $S_B = -k H$ é uma função crescente no tempo chegando ao máximo no estado onde o sistema atinge o equilíbrio termodinâmico, ou seja, quando a função de distribuição f atinge o estado final de equilíbrio f_{eq} . Essa grandeza S_B ficaria futuramente conhecida como entropia de Boltzmann e possibilitaria uma interpretação probabilística para a entropia termodinâmica de Clausius [34].

1.2 Mecânica Estatística

Mesmo com o trabalho de Boltzmann e Maxwell, a explicação microscópica para os resultados termodinâmicos como um todo só viria de fato com o surgimento da Mecânica Estatística (ME) com Josiah Willard Gibbs (1839-1903) ainda que suas raízes históricas remetam ao desenvolvimento da teoria cinética dos gases. Poderíamos dizer que a primeira ideia no sentido de compreender o comportamento cinético dos gases se deu no século XVIII por Daniel Bernoulli (1700 - 1782) ao perceber que a pressão de um gás resultava do impacto das moléculas sobre as paredes do recipiente foi capaz de explicar a lei de Boyle para os gases ideais.

Uma vez que as leis da Termodinâmica são válidas para qualquer sistema macroscópico sua explicação em termos mecânicos se fazia necessária. Desta forma seria necessário ir além do movimento de massas pontuais considerados na teoria cinética dos gases, e usar como base as leis da mecânica em sua forma mais geral. Os métodos de Gibbs enfim são baseados na formulação da mecânica desenvolvida por William Rowan Hamilton (1805-1865), onde um sistema mecânico é caracterizado por uma grandeza escalar (hamiltoniano) escrita em termos das coordenadas e momentos generalizados (\mathbf{q}, \mathbf{p}) das partículas do sistema.

Segundo a mecânica hamiltoniana o estado de um sistema constituído por N partículas em um dado instante de tempo é completamente definido pelas coordenadas generalizadas q_j e momentos conjugados p_j de cada partícula. Assim, se definirmos um hiper-espaço de dimensão $2nN$ sendo n os graus de liberdade de cada partícula o sistema fica completamente definido por um ponto neste espaço (espaço de fase). Permite-se portanto para um sistema hamiltoniano (conservativo) a existência de várias formas de distribuição desses pontos no espaço de fase coerentes com os vínculos macroscópicos como energia e temperatura, por exemplo.

A ideia de Gibbs foi portanto definir uma densidade $\rho_N(q_1, \dots, q_N; p_1, \dots, p_N)$ para esse

conjunto de pontos (ensemble) no espaço de fase

$$\int \rho_N(q_1, \dots, q_N; p_1, \dots, p_N) dq_1 \dots dp_N = N, \quad (1.3)$$

de maneira tal que a função de distribuição de N partículas, definida por $f_N(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{N} \rho_N(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ ³, mediria a densidade de probabilidade de se encontrar todas as N partículas nas respectivas coordenadas q_j com momentos p_j num dado instante de tempo t . O equilíbrio estatístico estaria portanto definido por

$$\frac{\partial f_N(\mathbf{q}, \mathbf{p})}{\partial t} = 0, \quad (1.4)$$

e representaria o estado mais provável para o sistema, ou seja, o estado onde os pontos no espaço de fase estaria melhor distribuído [1]. Neste momento Gibbs introduz um ponto chave para a ME de equilíbrio que é exatamente a conexão entre o conceito matemático de equilíbrio estatístico e o conceito físico de equilíbrio termodinâmico. Por exemplo, na definição do ensemble canônico, que representa a situação em que o sistema encontra-se em contato com um reservatório térmico, temos que

$$f_N = e^{\frac{(F-\mathcal{H})}{\theta}} \quad (1.5)$$

sendo F a energia livre e θ o módulo da distribuição, nesse caso, a temperatura do sistema. Desta forma, o problema inicialmente mecânico é resolvido do ponto de vista estatístico, e a conexão com a Termodinâmica se faz no limite termodinâmico por meio da identificação dos potenciais termodinâmicos com as energias livres. É válido salientar que mesmo assim Gibbs foi cauteloso ao definir f_N principalmente ao dizer que

“The distribution f_N (...) seems to represent the most simple case conceivable, since it has the property that when the system consists of parts with separate energies, the laws of the distribution in phase of the separate parts are of the same nature, a property which enormously simplifies the discussion, and is the foundation of extremely important relations to thermodynamics (Gibbs, 1902) [1].

Gibbs ainda chamaria a atenção para o fato de que essa definição restringiria algumas situações, como por exemplo no caso em que a interação é do tipo gravitacional ou coulombiana no espaço tridimensional,

“...It also excludes many cases in which energy can decrease without limit, as when the system contains materials points attracting each one another inversely as the square of their distances...” (Gibbs, 1902) [1].

³As variáveis \mathbf{q} e \mathbf{p} nesse momento representam as coordenadas e momentos de todas as partículas e não só de uma partícula individual.

Um ponto de importância fundamental na teoria estatística de Gibbs está no fato de que os ensembles são equivalentes no sentido de que conduzem ao mesmo resultado do ponto de vista termodinâmico. Lembramos que toda a construção da ME de Gibbs diz respeito a situações onde o sistema se comporta de maneira completamente ergódica como no microcanônico ou de acordo com os resultados da Termodinâmica usual quando em contato com um reservatório térmico.

Percebemos com isso que tanto a Termodinâmica quanto a ME de equilíbrio, no que dizem respeito aos seus fundamentos, foram inicialmente concebidas para sistemas ou sem interações (gases ideais), ou onde as interações eram de curto alcance quando comparada com a dimensionalidade do sistema [38].

De fato um dos primeiros passos, senão o principal, dado no sentido de compreender melhor a presença das interações entre as partículas levaria o físico holandês Johannes Diderik van der Waals (1837-1923) a mapear teoricamente as transições de fase ao considerar, ainda que de maneira bem limitada, os efeitos de tamanho devido às interações entre as partículas. Waals mostraria que por conta da interação surgia na região de transição a necessidade de construção de uma curva de coexistência de fases de modo a não violar-se as leis da Termodinâmica. Poderíamos nesse ponto levantar uma questão, e se as interações fossem de longo alcance, seria possível construir também uma curva de coexistência? Ou de maneira mais geral, onde no desenvolvimento da Termodinâmica e da ME de Gibbs são contemplados os sistemas com interações de longo alcance?

1.3 Sistemas com Interações de Longo Alcance

Definamos rigorosamente como sistema com interação de longo alcance aquele onde o potencial de interação intrínseco $V(\mathbf{r})$ é tal que,

$$\lim_{b \rightarrow \infty} \int_0^b V(r) d^d r \rightarrow \infty, \quad (1.6)$$

sendo d a dimensão do sistema. Tal representação para potenciais do tipo $V(r) = 1/r^{d+\sigma}$ reduz-se a condição onde $-d \leq \sigma \leq 0$. Admite-se ainda uma subdivisão dos sistemas com interações de longo alcance em:

- Forte quando $-d \leq \sigma \leq 0$ e
- Fraca quando $0 < \sigma < \sigma_c(d)$

onde $\sigma_c(d) = 2$ para $d \geq 4$ e $\sigma_c(d) = d/2$ para $d < 4$ [39, 40].

As interações de longo alcance tipo fracas seriam aquelas onde, mesmo a interação sendo de longo alcance, o sistema permanece com todas as propriedades termodinâmicas dos sistemas com interações de curto alcance, por exemplo são aditivos e extensivos e tem como estado final o estado de equilíbrio termodinâmico. Ainda assim, percebe-se o efeito da interação de longo alcance quando o sistema está em uma região de transições

de fases. Por exemplo consideremos o modelo de Dyson [41] para a interação de spins,

$$H = - \sum_{i,j} J(j) S_i S_{i+j} \quad (1.7)$$

sendo

$$J(j) = \frac{J}{j^{\sigma+1}} \quad (1.8)$$

onde sabe-se que o sistema exibe uma quebra espontânea de simetria em temperatura finita T_c mesmo no caso unidimensional. Se não considerarmos a interação entre os spins como de longo alcance o sistema é totalmente mapeado no modelo clássico de Ising onde sabe-se que não existe transição de fases em temperatura finita para o caso unidimensional [37].

Ao longo desse trabalho, contudo, sempre que nos referirmos a sistemas com interações de longo alcance referir-nos-emos a sistemas com interações do tipo forte ou seja, $-d \leq \sigma \leq 0$. Poderíamos dizer que a grande motivação para este trabalho seria responder a algumas das seguintes questões. Como seriam tratados do ponto de vista da Termodinâmica e ME de equilíbrio sistemas com interações de longo alcance? Seria possível definir parâmetros macroscópicos termodinâmicos como no caso dos sistemas com interações de curto alcance?

Experimentalmente, observações da distribuição de velocidades bem como do perfil de luminosidade em sistemas estelares [4, 5, 6, 7, 8, 42, 43, 44], e do perfil de densidade em plasmas não neutros confinados [45, 46, 47, 48, 49, 50] indicam que o sistema atinge alguma forma de equilíbrio. Por outro lado, os perfis de velocidade geralmente observados não equivalem aos de uma distribuição tipo Maxwell-Boltzmann, o que para partículas clássicas quando no equilíbrio termodinâmico é uma necessidade fundamental [51, 38].

Chandrasekar em 1943 já indicava que o tempo devido à relaxação colisional em sistemas auto-gravitantes divergia com o número de partículas [52]. Um pouco depois, Michel Hénon, matemático e astrônomo francês, em 1964 ao simular numericamente um sistema estelar com simetria esférica verificou que na ausência das colisões o sistema, inicialmente em um estado fora do equilíbrio, relaxava rapidamente para um estado que dependia fortemente da condição inicial onde permanecia por longo tempo [53].

Esses aspectos ligados ao tempo de relaxação e a dependência do estado inicial, oriundos da interação de longo alcance, já evidenciavam claramente o contraste com sistemas com interações de curto alcance onde a saber o tempo de relaxação geralmente não diverge com o número de partículas e o estado final do sistema corresponde ao estado de equilíbrio termodinâmico [35, 36, 37].

Resultados numéricos recentes com modelos de brinquedo (toy models) com interações de longo alcance [54, 55, 56, 57] tem permitido a análise mais detalhada da dinâmica e termodinâmica nesses sistemas. De forma simplificada apontamos os principais efeitos associados com esse tipo de interação.

- Efeitos Dinâmicos:

Divergência no tempo de relaxação colisional [58, 59];

Estado estacionário que não corresponde ao equilíbrio com distribuições de velocidades diferente da de MB [57, 60];

À medida que o número de partículas aumenta o sistema, quanto ao comportamento dinâmico, mostra-se cada vez mais regular [20, 61, 62, 63];

Nesses estados estacionários geralmente o balanço detalhado é violado [64, 65, 66].

- Efeitos Estatísticos e Termodinâmicos:

O estado de equilíbrio do ponto de vista da ME pode apresentar calor específico negativo [67, 68, 18, 69, 70];

A energia no sistema em geral escala super-linearmente [43, 71];

O sistema ainda que extensivo permanece não-aditivo [39, 71];

Os ensembles são não equivalentes [23, 72, 73, 74, 66].

Nesse sentido analisar o problema tanto do ponto de vista da ME como da dinâmica ou Termodinâmica é igualmente interessante e pode levar a resultados bem distintos do tradicional [2]. Deixamos, porém, claro que as ferramentas desenvolvidas tanto na ME como na Termodinâmica são para sistemas com interações de curto alcance, fazendo-se necessário portanto analisar o problema de um ponto de vista ainda mais fundamental.

D. Lynden-Bell em 1967 seria o primeiro a apresentar um modelo teórico capaz de descrever o estado estacionário atingido por um sistema auto-gravitante após sofrer um processo de relaxação não-colisional [67]. A teoria baseou-se em um processo chamado de relaxação violenta onde assumia-se que a função de distribuição rapidamente mudava sua forma aparentando macroscopicamente ir para um estado estacionário. A teoria de Lynden-Bell assumia que durante esse processo de relaxação o comportamento do sistema sendo ergódico possibilitaria definir um funcional para a entropia que quando maximizado determinaria de maneira auto consistente o estado estacionário mais provável para o sistema. Nesse mesmo princípio, outros modelos estatísticos foram propostos para a descrição estatística de sistemas com interações de longo alcance ([75] e referências), todos assumindo como verdadeira a premissa de que o sistema se mantém com um comportamento ergódico.

Do ponto de vista puramente observacional, alguns modelos também foram propostos como descritivos para sistemas auto-gravitantes, por exemplo, podemos citar os perfis de densidade de “de Vaucouleurs”, “Sérsic”, e “NFW” [76, 77, 78, 79, 80, 81, 82]. Em todos os casos os modelos são simplesmente para ajuste de dados sem uma motivação teórica mais fundamental quanto à natureza do problema.

De fato, não existe solução do ponto de vista da ME de equilíbrio para um sistema auto-gravitante no espaço tridimensional e isto emerge do fato de que as partículas em 3D podem escapar para o infinito [10, 83]. Da mesma maneira, as teorias estatísticas baseadas nesse processo de relaxação violenta não se mostraram promissoras na descrição dos sistemas com interações de longo alcance [84, 85, 86, 75, 87, 88], por conta de prever

uma massa infinita para o sistema como é o caso da teoria da relaxação violenta [67], principalmente quando o sistema desenvolve um comportamento não-ergódico [65, 89].

A dinâmica no espaço de fase é governada pela equação de Liouville,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \{\rho, \mathcal{H}\} = 0 \quad (1.9)$$

sendo ρ a densidade no espaço de fase que é função de todas as posições e momentos das partículas e $\{ \}$ o parêntese de Poisson. Determinar ρ num dado instante de tempo significa determinar todas as posições e momentos das partículas e conseqüentemente, resolver completamente o problema do ponto de vista dinâmico.

1.3.1 Equilíbrio termodinâmico

Se o sistema é finito a dinâmica do sistema é governada por uma equação similar à de Boltzmann eq. (1.1) e por conseqüência o estado de equilíbrio corresponde à distribuição de Maxwell-Boltzmann, que corresponde ao estado de equilíbrio termodinâmico. Analisemos as principais características desse estado de “equilíbrio termodinâmico”. Se a interação entre as partículas do sistema é de longo alcance significa que a energia interna do sistema $U \propto N^2$. Já a entropia, S , que é medida pelo número de maneiras de N partículas com energia total U , pode ser distribuída em um volume V , escala linearmente com o volume, independente de serem ou não as interações de longo alcance. Assim, no limite termodinâmico, a energia livre $F = U - TS$ é dominada pela energia interna para qualquer temperatura T finita, sugerindo que a entropia pode ser desprezada por completo o que resultaria inevitavelmente em uma termodinâmica trivial para o sistema.

No entanto, em muitos casos reais, como por exemplo em sistemas de tamanho finito como em pequenos *clusters* de átomos, a temperatura pode ser suficientemente elevada de modo que o termo entrópico na energia livre, TS , torne-se comparável a energia U . Em tais casos, a entropia não pode ser desprezada e a Termodinâmica não é trivial. Esse é o caso também de alguns sistemas auto-gravitantes tais como aglomerados globulares [60]. A fim de estudar teoricamente este limite, é conveniente redimensionar a energia (ou, alternativamente, redimensionar a temperatura) tornando a contribuição de U para a energia livre F da mesma magnitude da entropia S . Esta reescala é popularmente conhecida como prescrição de Kac (Kac Prescription) e foi inicialmente proposta no sentido de garantir a existência de limite termodinâmico para o sistema [90].

1.3.1.1 Extensividade

Na prática, contornaremos a não-extensividade na energia reescalando o potencial de interação entre as partículas $\psi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ de modo que $U \propto N$ [90]. Esta reescala pode ser feita na carga ou massa das partículas em questão, por exemplo, nos feixes de partículas carregadas em especial, esta reescala é feita da seguinte maneira $q \rightarrow q/\sqrt{N}$.

1.3.1.2 Aditividade

Embora mesmo com essa reescala o sistema ainda permanece não-aditivo, no sentido de que a energia de dois sub-sistemas isolados não é igual à energia total do sistema quando em conjunto por conta do termo devido à energia da interface. Esta não aditividade, em geral, é mapeada em um comportamento não-ergódico para o sistema o que do ponto de vista dinâmico significa que o sistema não tem a mesma probabilidade de visitar todas as regiões do espaço de fase. É nesse sentido que acredita-se que a inequivalência entre os ensembles estatísticos deve surgir.

É importante nesse ponto salientar que esta não-aditividade não é um privilégio somente dos sistemas com interações de longo alcance. Em sistemas com interações de curto alcance onde a energia da interface e do sistema são comparáveis, como por exemplo em *cluster* de átomos, evidencia-se também a presença de calor específico negativo [39, 71].

1.3.1.3 Relaxação Lenta

No que diz respeito à relaxação sabe-se que em sistemas com interações de curto alcance o processo de relaxação de um estado termodinamicamente instável é relativamente rápido [59].

Já em sistemas com fortes interações de longo alcance o processo de relaxação a partir de um estado termodinamicamente instável não precisa ser rápido e pode divergir com o tamanho do sistema. O motivo é que no caso das interações de longo alcance não se pode definir um tamanho crítico para um domínio ordenado uma vez que as energias da superfície e do (bulk) são da mesma ordem [91]. Isto significa que no limite termodinâmico o sistema demora um tempo infinito para atingir o equilíbrio termodinâmico. Neste sentido, todas as ferramentas teóricas tanto do ponto de vista da ME de equilíbrio bem como da Termodinâmica não são efetivas na descrição do estado real do sistema [3].

1.3.2 Limite termodinâmico

Se o sistema encontra-se no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$ então a dinâmica passa a ser governada exatamente pela equação de Vlasov [92] em algumas referências também denominada como equação de Boltzmann sem colisões [93]. A proposta desse trabalho é estudar o processo de relaxação em sistemas com interações de longo alcance fortes quando no limite termodinâmico. Note que, o limite termodinâmico adotado na tese difere um pouco do tradicional pois assumiremos que $N \rightarrow \infty$ enquanto que a massa ou carga total do sistema permanece fixa. Tal convenção é razoável uma vez que o volume nem sempre é bem definido em sistemas com interações de longo alcance.

O foco principal desse trabalho é portanto o de analisar os estados estacionários atingidos pelo sistema em detrimento do estado de equilíbrio termodinâmico. Por uma questão de rigor, designaremos esses estados estacionários por quasi-estacionários ou simplesmente (qSS). Lembramos que em muitos casos a solução para o equilíbrio existe [12, 94, 95, 96] mas o sistema demora um tempo muito grande para atingi-lo, por exemplo em galáxias elípticas o tempo estimado para que o sistema atinga o equilíbrio colisional é da or-

dem de 10^{18} anos, nada mais nada menos que 10^8 vezes maior que o tempo de vida do universo [93, 97].

Ainda assim abordaremos as soluções de equilíbrio no limite de campo médio justamente para mostrar as escalas de tempo de relaxação do sistema para alguns modelos. Nesse sentido o ponto forte desta tese vai estar principalmente na descrição dos sistemas com interações de longo alcance no chamado limite termodinâmico, especificamente na descrição dos qSS.

1.4 Metodologia e Plano de Tese

A metodologia aplicada na construção da tese será analisar teórica e numericamente o processo de relaxação em sistemas auto-gravitantes, plasmas não-neutros e de maneira resumida analisar um modelo para a interação tipo spin. A tese será organizada da seguinte maneira:

- No Cap. 1 faremos uma breve introdução histórica da construção da Termodinâmica bem como da Mecânica Estatística de Equilíbrio. Abordaremos ainda onde são contemplados os sistemas com interações de longo alcance em ambas as teorias e indicaremos o caminho natural na descrição desses sistemas.
- No Cap. 2 descreveremos teoricamente como os sistemas com interações de longo alcance são descritos do ponto de vista dinâmico por meio das hierarquias BBGKY.
- No Cap. 3 abordaremos o problema da relaxação em sistemas auto-gravitantes onde descreveremos as limitações existentes na descrição estatística do sistema tridimensional. Motivaremos com isso o estudo dos sistemas em uma e duas dimensões sendo que em ambos os casos descreveremos totalmente o sistema; a saber, tanto o estado estacionário quanto o estado de equilíbrio.
- No Cap. 4 abordaremos o problema da relaxação em um sistema constituído por feixes de partículas carregadas. Analisaremos os parâmetros mais relevantes na física desses sistemas e compararemos os resultados com alguns pontos experimentais.
- No Cap. 5 analisaremos um sistema que exhibe, além das características anteriores, efeitos de quebra espontânea de simetria, ou seja, transições de fase. Em particular verificaremos como ocorrem as transições de fase nos estados fora do equilíbrio, e quais as condições em que as teorias propostas são eficientes na descrição dos sistemas.
- No Cap. 6 apresentaremos as conclusões do trabalho mostrando os principais resultados obtidos bem como as perspectivas para futuros trabalhos.
- Nos apêndices exporemos os processos numéricos utilizados na dinâmica molecular bem como descreveremos a estratégia utilizada na solução numérica de equações não lineares como vínculos.

- Ao final da tese adicionaremos as referências bibliográficas utilizadas no desenvolvimento da tese bem como adicionaremos as cópias dos trabalhos publicados oriundos durante o desenvolvimento da tese.

Modelagem do Problema

Neste capítulo, exporemos a modelagem do problema apresentando os métodos que serão utilizados na abordagem dos sistemas com interações de longo alcance. Um tratamento mais rigoroso pode ser encontrado em [92, 98, 21, 99]

2.1 Teoria Cinética

Do ponto de vista dinâmico, pode-se tratar um sistema hamiltoniano constituído por N partículas, através das hierarquias BBGKY [100]. A dinâmica do sistema nessa hierarquia é definida em um espaço de dimensão $2Nd$ pela função de distribuição individual f_1 , mais as funções de distribuição reduzida f_s das partículas ($s > 1$)¹. Para um sistema de partículas interagindo por um potencial ψ e submetidas a um potencial externo ϕ^{ext} , essa hierarquia é dada por:

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{n=1}^s \left[\mathbf{p}_n \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_n} - \left(\frac{\partial \phi^{ext}}{\partial \mathbf{q}_n} + \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq n}}^s \frac{\partial \psi(\mathbf{q}_n - \mathbf{q}_l)}{\partial \mathbf{q}_n} \right) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_n} \right] \right\} f_s = \sum_{n=1}^s \int d\mathbf{q}_{s+1} d\mathbf{p}_{s+1} \frac{\partial \psi(\mathbf{q}_n - \mathbf{q}_{s+1})}{\partial \mathbf{q}_n} \cdot \frac{\partial f_{s+1}}{\partial \mathbf{p}_n}. \quad (2.1)$$

Nessa equação, todos os termos entre colchetes têm dimensão de $(tempo)^{-1}$ de modo que podemos estimar suas magnitudes relativas usando escalas de velocidades e de comprimento típicas.

1. Os termos proporcionais a

$$\frac{1}{\tau_{\phi^{ext}}} \sim \frac{\partial \phi^{ext}}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \sim \frac{v}{L} \quad (2.2)$$

estão relacionados a variações espaciais do potencial *extrínseco* sobre distâncias macroscópicas L , sendo v a velocidade típica de uma partícula no sistema.

¹Sendo d o número de graus de liberdade das partículas no sistema e s representa o índice para a função de distribuição reduzida de duas partículas ($s = 2$), três ($s = 3$) e assim por diante.

2. Para termos proporcionais ao potencial *intrínseco* do sistema, pode-se extrair duas escalas de tempo, uma relacionada com o intervalo entre as colisões

$$\frac{1}{\tau_\psi} \sim \frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{q}} \cdot \frac{\partial}{\partial\mathbf{p}} \sim \frac{v}{\lambda}, \quad (2.3)$$

e outra relacionada com a probabilidade de encontrar uma partícula por unidade de volume

$$\frac{1}{\tau_x} \sim \int d\mathbf{q}d\mathbf{p} \frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{q}} \cdot \frac{\partial}{\partial\mathbf{p}} \frac{f_{s+1}}{f_s} \sim \frac{1}{\tau_\psi} n\lambda^3, \quad (2.4)$$

onde λ está relacionado com o alcance da interação e n é a densidade das partículas do sistema.

Podemos, nesse ponto, analisar as hierarquias em duas regiões bem distintas do ponto de vista de $n\lambda^3$. Para sistemas com interações de curto alcance, $n\lambda^3 \ll 1 \Leftrightarrow \tau_\psi \ll \tau_x$ de modo que as correlações mais significativas no sistema são as relacionadas a pares de partículas (colisões binárias). Consequentemente, pode-se simplificar a hierarquia (2.1) às duas primeiras equações e a dinâmica do sistema é governada pela equação de Boltzmann,

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{p}_1 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_1} - \frac{\partial\phi^{ext}}{\partial \mathbf{q}_1} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \right] f_1 = \int d\mathbf{q}_2 d\mathbf{p}_2 \frac{\partial\psi(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2)}{\partial \mathbf{q}_1} \cdot \frac{\partial f_2}{\partial \mathbf{p}_1}, \quad (2.5)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{p}_1 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_1} - \frac{\partial\phi^{ext}}{\partial \mathbf{q}_1} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} + \mathbf{p}_2 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_2} - \frac{\partial\phi^{ext}}{\partial \mathbf{q}_2} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} - \frac{\partial\psi(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2)}{\partial \mathbf{q}_1} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} \right) \right] f_2 = 0, \quad (2.6)$$

na qual assume-se que o potencial de interação entre as partículas é simétrico. A solução única dessa equação é a distribuição de Maxwell-Boltzmann, [37].

$$f_{MB}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = C n(\mathbf{q}) e^{-\beta p^2/2m}, \quad (2.7)$$

sendo C uma constante de normalização, o que comprova a existência de equilíbrio termodinâmico para sistemas com interações de curto alcance.

Para sistemas com interações de longo alcance, $n\lambda^3 \gg 1 \Leftrightarrow \tau_\psi \gg \tau_x$ assim, voltando à hierarquia (2.1) percebemos que as funções de distribuição reduzida podem ser reescritas como,

$$f_1(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \left\langle \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_i) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i) \right\rangle = N \int \prod_{i=2}^N d\mathbf{q}_i d\mathbf{p}_i \rho(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \mathbf{q}_2, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{q}_N, \mathbf{p}_N, t), \quad (2.8)$$

$$f_2(\mathbf{q}_1, \mathbf{p}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{p}_2, t) = N(N-1) \int \prod_{i=3}^N d\mathbf{q}_i d\mathbf{p}_i \rho(\mathbf{q}_1, \mathbf{p}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{q}_N, \mathbf{p}_N, t), \quad (2.9)$$

⋮

$$f_s(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{p}_s, t) = \frac{N!}{(N-s)!} \int \prod_{i=s+1}^N d\mathbf{q}_i d\mathbf{p}_i \rho(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{p}_N, t), \quad (2.10)$$

onde $\rho(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{p}_N, t)$ está relacionado com a densidade de probabilidade de se encontrar qualquer uma das N partículas na posição \mathbf{q}_i com momento \mathbf{p}_i . Nesse limite, $n\lambda^3 \gg 1$,

pode-se assumir que a densidade ρ das N partículas é igual ao produto das densidades de uma partícula, $\rho(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{p}_N, t) = \prod_{i=1}^N \rho_1(\mathbf{q}_i, \mathbf{p}_i, t)$ que consiste na aproximação de campo médio, exata no limite termodinâmico [98, 101]. Desta forma obtemos que,

$$\frac{f_{s+1}}{f_s} = (N - s)\rho_1(\mathbf{q}_{s+1}, \mathbf{p}_{s+1}, t). \quad (2.11)$$

Portanto, voltando à hierarquia BBGKY (2.1) temos,

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{n=1}^s \left(\mathbf{p}_n \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_n} - \frac{\partial \phi^{ext}}{\partial \mathbf{q}_n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_n} \right) \right] f_s \\ &= \sum_{n=1}^s \left(\int d\mathbf{q}_{s+1} d\mathbf{p}_{s+1} \frac{\partial \psi(\mathbf{q}_n - \mathbf{q}_{s+1})}{\partial \mathbf{q}_n} \cdot \frac{\partial f_{s+1}}{\partial \mathbf{p}_n} + \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq n}}^s \frac{\partial \psi(\mathbf{q}_n - \mathbf{q}_l)}{\partial \mathbf{q}_n} \right) \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$\approx \sum_{n=1}^s \int d\mathbf{q}_{s+1} d\mathbf{p}_{s+1} \frac{\partial \psi(\mathbf{q}_n - \mathbf{q}_{s+1})}{\partial \mathbf{q}_n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_n} [(N - s)f_s \rho_1(\mathbf{q}_{s+1}, \mathbf{p}_{s+1}, t)] \quad (2.13)$$

$$\approx \sum_{n=1}^s N \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_n} \left[\int d\mathbf{q}_{s+1} d\mathbf{p}_{s+1} \rho_1(\mathbf{q}_{s+1}, \mathbf{p}_{s+1}, t) \psi(\mathbf{q}_n - \mathbf{q}_{s+1}) \right] \cdot \frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{p}_n}, \quad (2.14)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{n=1}^s \left(\mathbf{p}_n \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_n} - \frac{\partial U_{eff}}{\partial \mathbf{q}_n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_n} \right) \right] f_s \approx 0, \quad (2.15)$$

onde,

$$U_{eff} = \phi^{ext}(\mathbf{q}) + N \int d\mathbf{q}' d\mathbf{p}' \psi(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \rho_1(\mathbf{q}', \mathbf{p}', t), \quad (2.16)$$

ou,

$$U_{eff} = \phi^{ext}(\mathbf{q}) + \langle \psi(\mathbf{q}) \rangle, \quad (2.17)$$

onde $\langle \psi(\mathbf{q}) \rangle = N \int d\mathbf{q}' d\mathbf{p}' \psi(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \rho_1(\mathbf{q}', \mathbf{p}', t)$ que por simplicidade doravante designaremos simplesmente por $\psi(\mathbf{q})$.

2.2 Equação de Vlasov

Para passar de (2.12) para (2.13) usamos o fato de que $\tau_\psi \gg \tau_x$ e de (2.13) para (2.14) assumimos que $N \gg s$. Assim, no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$), todas as equações da hierarquia BBGKY são equivalentes à equação para a função de distribuição de uma partícula e a equação (2.15) passa a ser exata

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{p} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial U_{eff}}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) f_1(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = 0. \quad (2.18)$$

Note que nesse limite a interação de par perde sentido e a dinâmica do sistema é governada por processos coletivos representados na interação de campo médio $\psi(\mathbf{q})$. Isso significa que um sistema de partículas com interações de longo alcance no limite ($N \rightarrow \infty$) pode ser tratado como um fluido, onde uma partícula, agora sendo um elemento de fluido, sente um potencial médio devido ao restante do sistema. A Eq. (2.18), conhecida como equação de Vlasov, tem uma demonstração mais rigorosa em [98] e descreve exatamente a dinâmica de sistemas sujeitos a interação de longo alcance [102, 103] ainda que tenha sido derivada originalmente por Vlasov de uma forma diferente [92].

2.2.1 Propriedades da equação de Vlasov

A evolução dinâmica desta equação é similar à de um fluido incompressível onde $f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$, a função de distribuição, é similar à densidade do fluido no espaço de fase ², e U_{eff} é o potencial efetivo sentido por um elemento de fluido localizado em \mathbf{q} . Dentre outras características, a equação de Vlasov evolui preservando um número infinito de invariantes dinâmicos denominados integrais de Casimir ou simplesmente, Casimir, $C(f)$ [102],

$$C(f) = \int s(f) d\mathbf{q} d\mathbf{p}, \quad (2.19)$$

onde $s(f)$ é uma função arbitrária da função de distribuição. Alguns exemplos com ênfase física são:

- $s(f) = 1 \Leftrightarrow C(f) \Rightarrow$ hiper-volume no espaço de fase
- $s(f) = f \ln f \Leftrightarrow C(f) \Rightarrow$ entropia de Gibbs.

O hiper-volume no espaço de fase também é preservado, e a evolução da função de distribuição se dá seguida de uma filamentação em uma escala cada vez menor, como ilustrado na Fig. 2.1.

Se inicialmente a função de distribuição $f_0(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ for discretizada em p níveis η_j , a dinâmica de Vlasov para esse sistema d dimensional preserva o hiper-volume de cada nível $C(\eta_j) = \int \delta[f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) - \eta_j] d\mathbf{q} d\mathbf{p}$. Neste trabalho analisaremos somente distribuições inicialmente normalizadas de um nível do tipo

$$f_0(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \eta \Theta(q_{max} - |\mathbf{q}|) \Theta(p_{max} - |\mathbf{p}|), \quad (2.20)$$

onde $\Theta(x)$ é a função de Heaviside ³, q_{max} e p_{max} representam os valores máximos para as coordenadas e momentos generalizados e η representa densidade normalizada no espaço de fase.

Dentre estes Casimirs notamos que a entropia de Gibbs permanece constante durante a dinâmica de Vlasov. De fato se tratamos um sistema finito a dinâmica não é governada exatamente pela equação de Vlasov uma vez que permanece um termo de ordem $1/N$

²Doravante referir-nos-emos simplesmente à função de distribuição, subtendendo portanto que trata-se da função de distribuição reduzida de uma partícula.

³ $\Theta(x) = 1$ se $x > 0$ e $\Theta(x) = 0$ se $x \leq 0$.

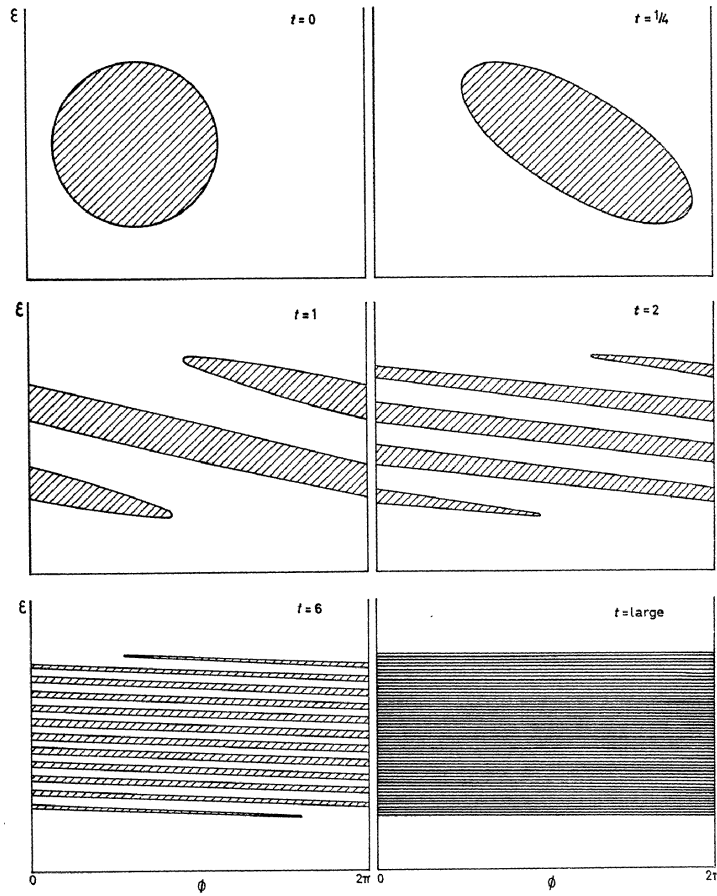


Figura 2.1 Evolução, em termo das variáveis de ação-ângulo (ε, ϕ) da função de distribuição na dinâmica de Vlasov: A função de distribuição filenta-se no espaço de fase preservando o volume inicial (figura retirada de [67]).

na equação (2.14). Neste caso a equação de Vlasov tem um comportamento similar à de Boltzmann onde as colisões são completamente mapeadas em efeitos de N finito e, portanto, a entropia de Boltzmann cresce com o tempo. Este efeito também é percebido ao se resolver numericamente a equação de Vlasov onde por efeito de granulação verifica-se um crescimento de entropia [104, 105] ainda que no limite termodinâmico a entropia, por ser definida em termos da função de distribuição reduzida de uma partícula, permanece constante.

É importante salientar que na dinâmica de Liouville a entropia de Gibbs definida em termos de f_N também permanece constante pois $\frac{\partial f_N}{\partial t} = 0$. Nesse caso porém por um processo de *coarsening* consegue-se construir, em geral via um processo de contagem, a entropia para o macroestado vinculado aos parâmetros termodinâmicos que corresponde à entropia de Boltzmann, essa entropia por sua vez quando maximizada conduz aos

resultados coerentes com a termodinâmica de equilíbrio [35, 31, 33, 101, 106]⁴. Aqui porém, esse processo de *coarsening* pode ser feito mas a entropia do estado macroscópico corresponde a um estado diferente do de MB como veremos logo em seguida.

2.2.2 Teorias Estatísticas para dinâmica de Vlasov

Observando a Fig. 2.1 em uma escala macroscópica (de grão grosso) percebe-se que a função de distribuição parece deixar de evoluir no tempo chegando em um estado macroscopicamente estacionário. Rigorosamente esse estado é quasi-estacionário, pois a função de distribuição na escala microscópica (de grão fino) continua evoluindo.

2.2.2.1 Relaxação Violenta

Esta foi a idéia central de Lynden-Bell 1967, observar sistemas nesta escala macroscópica e tentar construir o estado estacionário atingido pelo sistema. Fisicamente, essa granulação implica que para o estado quasi-estacionário, as flutuações sentidas na velocidade e posição de uma partícula do sistema não são relevantes para determinar o comportamento macroscópico do sistema. Desta forma, podemos substituir a função de distribuição microscópica $f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ por uma macroscópica $\bar{f}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$, que é a média de $f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ sobre uma macrocélula de tamanho $d\mathbf{q}d\mathbf{p}$ (Fig. 2.2). Como o sistema relaxa para um estado estacionário, então $\bar{f}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ deve também relaxar para uma função de distribuição final $\bar{f}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$.

Para sistemas gravitacionais, esse processo foi denominado de relaxação violenta pois acontecia sobre uma escala de tempo da ordem do tempo dinâmico do sistema. Lynden-Bell assumiu que durante esse processo além da função de distribuição evoluir preservando os hiper-volumes de cada nível, a mistura no espaço de fase se dá de maneira completa (ergódica)⁵. Portanto $\bar{f}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ pode ser determinada em uma escala macroscópica utilizando um processo de contagem similar ao micro-canônico na ME de equilíbrio.

Para tal dividimos o espaço de fase em ξ macrocélulas sendo essas, por sua vez, divididas em ν microcélulas de volume h^d , conforme ilustrado na Fig. 2.2.

Após o sistema evoluir no tempo, a função de distribuição que inicialmente só ocupava algumas macrocélulas, sofre um processo de mistura e tende a ocupar outras macrocélulas espalhando-se no espaço de fase conforme a Fig. 2.3.

Para a ξ -ésima macrocélula, $\rho(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \bar{f}(\mathbf{q}, \mathbf{p})/\eta$ é definido como o número n_i de microcélulas ocupadas pelo nível η dividido por ν ,

$$\rho(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{n_i}{\nu}. \quad (2.21)$$

Devido a incompressibilidade na dinâmica de Vlasov, observando as Figs. 2.2 e 2.3, fica evidente que em cada macrocélula ξ uma condição a ser mantida é que cada microcélula

⁴Assumindo-se que o sistema se comporte de maneira ergódica de modo a justificar o processo de contagem.

⁵Como na ME de equilíbrio essa premissa é assumida *a priori* sem nenhuma justificativa rigorosa.

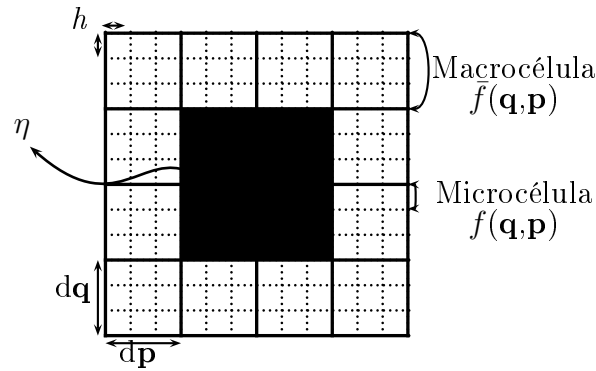


Figura 2.2 Distribuição inicial, macroscópica e microscópica, para a função de distribuição de um nível η com $d = 1$.

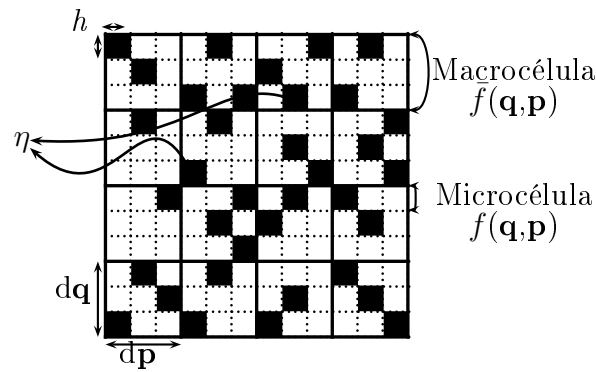


Figura 2.3 Distribuição final, macroscópica e microscópica, para a função de distribuição de um nível η com $d = 1$.

tenha no máximo um nível η , ou seja, a densidade

$$\rho(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \leq 1. \quad (2.22)$$

Se a mistura no espaço de fase se dá de maneira completa, pode-se assumir que o nível η da distribuição tem igual probabilidade de ocupar todas as microcélulas do espaço de fase permitidas pelo sistema. Desta forma podemos utilizar a análise combinatória para definir a entropia macroscópica deste sistema, similarmente ao que fazemos no ensemble micro-canônico na ME de equilíbrio. Examinando uma dada macrocélula ξ , contendo ν microcélulas das quais n_i estão ocupadas, o número de formas distintas dessas n_i microcélulas serem ocupadas é dada por

$$\frac{\nu!}{(\nu - n_i)!} \quad (2.23)$$

sendo que o número total N de microcélulas ocupadas permanece constante

$$N = \sum_i n_i. \quad (2.24)$$

O número de formas distintas dessas N microcélulas se dividirem sobre as ξ macrocélulas é dado por

$$\frac{N!}{\prod_i n_i!}, \quad (2.25)$$

dessa forma, o número total de microestados W que o sistema pode ter é dado por,

$$W(n_i) = \frac{N!}{\prod_i n_i!} \prod_i \frac{\nu!}{(\nu - n_i)!}. \quad (2.26)$$

A entropia macroscópica do sistema é dada por $S_{lb} \equiv -k_B \ln W(n_i)$ onde k_B é a constante de Boltzmann [102]. No limite em que $\rho(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ varia infinitesimalmente na escala de uma macrocélula a entropia assume a forma

$$S_{lb} = -k_B \int \frac{d\mathbf{q}d\mathbf{p}}{h^d} \{ \rho(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \ln[\rho(\mathbf{q}, \mathbf{p})] + [1 - \rho(\mathbf{q}, \mathbf{p})] \ln[1 - \rho(\mathbf{q}, \mathbf{p})] \}, \quad (2.27)$$

e portanto $\bar{f}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \eta \rho(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ é completamente determinada ⁶.

A relaxação não-colisional conduz o sistema para um estado estacionário no qual a densidade $\rho(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ é a mais provável. Além da conservação do volume outros vínculos são impostos pela dinâmica: conservação de energia, *momentum* e *momentum* angular. Particularmente neste trabalho os vínculos relevantes à dinâmica serão somente: a conservação da energia e do volume no espaço de fase uma vez que os *momenta* são, sem perda de generalidade, inicialmente nulos.

$$\int E(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \bar{f}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) d\mathbf{q}d\mathbf{p} = \mathcal{E}_0, \quad (2.28)$$

$$\int \bar{f}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) d\mathbf{q}d\mathbf{p} = 1,$$

onde definimos $\bar{f}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ normalizada ao número de partículas sendo $E(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m} + \frac{\psi(\mathbf{q})}{2} + \phi^{ext}(\mathbf{q})$ e \mathcal{E}_0 a energia inicial do sistema ⁷. Dessa forma maximizando a entropia macroscópica, o estado estacionário é completamente determinado em termos da densidade $\rho(\mathbf{q}, \mathbf{p})$,

$$\delta(S_{lb}) + \alpha \delta \left(\int \bar{f}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) d\mathbf{q}d\mathbf{p} - 1 \right) + \beta \delta \left(\int E(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \bar{f}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) d\mathbf{q}d\mathbf{p} - \mathcal{E}_0 \right) = 0. \quad (2.30)$$

⁶No caso em que distribuição inicial tem “ p ” níveis pode-se, equivalentemente, mostrar que a entropia é dada por $S_{lb} = -k_B \int \frac{d\mathbf{q}d\mathbf{p}}{h^d} \{ \sum_{j=1}^p \rho_j(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \ln[\rho_j(\mathbf{q}, \mathbf{p})] + [1 - \sum_{j=1}^p \rho_j(\mathbf{q}, \mathbf{p})] \ln[1 - \sum_{j=1}^p \rho_j(\mathbf{q}, \mathbf{p})] \}$.

⁷Rigorosamente se o potencial não se anula no infinito ou em algum ponto do espaço no cálculo da energia adicionamos uma constante infinita $\lim_{b \rightarrow \infty} \psi(b)$,

$$E(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} \left[\psi(\mathbf{q}) - \lim_{b \rightarrow \infty} \psi(b) \right] + \phi^{ext} \quad (2.29)$$

onde a função de distribuição é dada simplesmente por,

$$f_{lb}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \bar{f}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{\eta}{1 + e^{\beta[\epsilon(\mathbf{q}, \mathbf{p}) - \mu]}} \quad (2.31)$$

onde $\epsilon(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m} + \psi(\mathbf{q}) + \phi^{ext}(\mathbf{q})$. Os multiplicadores de Lagrange β e $\mu = \alpha/\beta$, que para sistemas em equilíbrio estão relacionados com o inverso da temperatura e potencial químico, não tem este significado pois o estado estacionário atingido não corresponde ao equilíbrio. A expressão (2.31) é similar à função de distribuição de férmions para sistemas em equilíbrio. Isso é natural haja visto que uma dada microcélula só pode ser ocupada por um nível η , o que introduz um vínculo de exclusão no espaço de fase do sistema.

Ainda assim, quando o processo de mistura se dá de maneira incompleta a teoria da relaxação violenta mostra-se insuficiente na descrição dos qSS. O problema geral tanto na ME de equilíbrio como nesse caso é que se o sistema tem um comportamento não ergódico o processo de contagem fica comprometido e portanto a expressão derivada anteriormente não tem razão alguma para ser descritiva nesses estados. Outro ponto importante é que a natureza dos qSS é totalmente distinta do estado de equilíbrio termodinâmico onde, por exemplo, pode-se colocar o sistema em contato com um banho térmico e com isso determinar as propriedades estatísticas do sistema, via o processo canônico.

2.2.2.2 Distribuição Núcleo-Halo

Nos casos em que o processo de mistura se dá de maneira incompleta o estado quasi-estacionário é mais rigorosamente dependente da dinâmica do sistema. Sabe-se ainda que do ponto de vista dinâmico o sistema pode desenvolver ondas de densidade suficientes para priorizar algumas regiões do espaço de fases [107, 50, 108, 14, 88] o que de certa maneira justifica o comportamento não-ergódico para o sistema. Essas ondas de densidade [109, 83, 110, 111], expressam puramente o caráter de longo alcance da interação sendo em geral oriundas de efeitos puramente dinâmicos. Como consequência, na grande maioria dos casos, como mostraremos ao longo da tese, o sistema vai apresentar no estado estacionário uma separação de fases. As fases no geral tem dois perfis distintos em densidade, uma região central e densa intitulada de núcleo e outra mais externa e menos densa denominada de halo. Essa separação de fases já é conhecida na literatura mas quantitativamente nenhum trabalho foi desenvolvido capaz de modelar estas estruturas [112].

Um outro comportamento notável nos sistemas com interações de longo alcance está relacionado com o fato de que quando o sistema relaxa para o estado estacionário ele passa a se comportar de maneira regular. Isso para um sistema com muitos graus de liberdade vai de encontro com as teorias baseadas no caos hamiltoniano nas quais um sistema perde a sua integrabilidade à medida que aumenta em dimensão (graus de liberdade) [113, 114, 107]. Ainda assim podemos justificar esse comportamento haja visto que por ser descrito pela equação de Vlasov [98, 103] em detrimento da de Boltzmann [100] as partículas no sistema iinteragem fortemente com um potencial de campo médio oriundo de todas outras partículas do sistema [98, 115] e como o sistema se comporta como um “fluido” é razoável que apresente tal comportamento.

Com base no conhecimento dos processos físicos no processo de relaxação propomos

que a estrutura do estado quase-estacionário seja perfeitamente modelada por uma função de distribuição tipo

$$f_{ch}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \bar{f}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \eta\Theta(\epsilon_F - \epsilon(\mathbf{q}, \mathbf{p})) + \chi\Theta(\epsilon_h - \epsilon(\mathbf{q}, \mathbf{p}))\Theta(\epsilon(\mathbf{q}, \mathbf{p}) - \epsilon_F) \quad (2.32)$$

onde ϵ_F e χ e ϵ_h parâmetros obtidos de maneira auto-consistente. Os detalhes de como chega-se nesta aproximação serão explicados *a posteriori* no decurso da tese pois dependem da dinâmica particular em cada situação. A Eq. 2.32 aponta para uma separação de fases que ocorre no espaço coerente com os resultados observacionais.

2.3 Equação de Poisson

A grande vantagem de se determinar a função de distribuição *a priori* por métodos estatísticos é que nesse caso determinar o estado estacionário significa simplesmente resolver a equação de Poisson [116],

$$\nabla_d^2 \psi(\mathbf{q}) = \mathcal{A}C_d \rho(\mathbf{q}) , \quad (2.33)$$

com os vínculos impostos pela dinâmica 2.28, o que reduz de maneira significativa o tratamento teórico. Na Eq. (2.33) $\rho(\mathbf{q}) = \int f(\mathbf{q}, \mathbf{p})d\mathbf{p}$, $C_d = 2\pi^{d/2}/\Gamma(\frac{1}{2}d)$ e \mathcal{A} está associado com as constantes físicas de cada problema em específico.

CAPÍTULO 3

Gravitação

Neste capítulo iniciaremos a análise dinâmica e estatística dos sistemas auto-gravitantes. O objetivo maior é demonstrar os principais efeitos dinâmicos associados ao processo de relaxação e construir uma teoria estatística capaz de descrever o perfis de massa e velocidade após o sistema sofrer um processo de relaxação não-colisional.

A grande motivação para isso é que uma das questões mais fundamentais da astrofísica diz respeito à distribuição de massa quando um sistema auto-gravitante relaxa para o equilíbrio. Este problema, colocado mais de seis décadas atrás, ainda continua em aberto, como descrevemos na introdução. No contexto astrofísico, entender esse processo de relaxação pode lançar luz sobre uma série de intrigantes questões tais como, qual o mecanismo físico responsável pelas regularidades observadas no perfil de luminosidade das galáxias elípticas bem na distribuição de massa nos halos de matéria escura? As simulações clássicas de Navarro, Frenk e White [80] produziram os perfis de densidade de halos de matéria escura que nenhuma teoria atual é capaz de explicar [7, 56, 67, 9, 44, 97]. O escopo do problema se estende desde os fundamentos da mecânica estatística à evolução do universo em grande escala [12].

3.1 Problema em 3D

Como o próprio Gibbs notara, o problema da gravitação em 3D é extremamente difícil de solucionar, principalmente porque a distribuição se estende até o infinito e a energia de interação pode colapsar para zero [12, 102, 117]. O potencial de interação é definido pela equação de Poisson (2.33) onde $\mathcal{A} = GM$ ou seja,

$$\nabla^2 \psi^{3D}(r) = 4\pi GM \int f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3\mathbf{v} \quad (3.1)$$

cada partícula no sistema tem massa $m = M/N$ de modo que no limite termodinâmico a massa total M permanece constante¹. Assumiremos que o potencial $\psi^{3D}(r)$ tem simetria radial de modo que as partículas aqui possam sem perda de generalidade ser representadas por cascas esféricas de massa m . Obviamente isso constitui uma aproximação que além de conveniente, pois facilita sobremaneira as simulações numéricas, torna-se exata no limite termodinâmico, apêndice A.

¹Chamamos a atenção para o fato de que nesse caso como a massa “m” é constante podemos utilizar “v” ao invés de “p” contudo, lembramos que estaremos sempre tratando de momentos e não de velocidades.

Por convenção mediremos todas as distâncias em termos de um comprimento típico arbitrário r_0 e as unidades de tempo serão medidas em termos do tempo dinâmico,

$$\tau_D^{3D} = \sqrt{\frac{r_0^3}{GM}}. \quad (3.2)$$

Nessas condições a equação de Poisson (3.1) reduz-se para

$$\nabla^2 \psi^{3D}(r, t) = 4\pi \int f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3\mathbf{v}. \quad (3.3)$$

Para uma distribuição de massa localizada na origem $\rho(r) = \delta(r)$ a função de Green que é solução da equação de Poisson é dada simplesmente por,

$$G^{3D}(r) = 1/r \quad (3.4)$$

o que significa que o potencial diverge para pequenas distâncias.

Um ponto que torna o problema da gravitação em $3D$ peculiar está ligado exatamente com o fato de que como o potencial em $3D$ não é confinante algumas partículas podem ganhar energia suficiente para escapar completamente do sistema indo para o infinito. Essa divergência faz com que não exista equilíbrio termodinâmico para sistemas em $3D$. Em um estudo recente [117] mostrou-se que no limite termodinâmico o sistema apresenta duas fases bem distintas dependendo da condição inicial. Em uma delas é bem descrito pela teoria da relaxação violenta e em outro caso a fase estacionária tem pelo menos duas populações distintas de partículas: partículas que relaxam para formar um núcleo central e partículas que evaporam completamente para o infinito. Por conta da restrição associada com o processo de evaporação no espaço em $3D$ vamos restringir nossa atenção inicialmente para o sistema auto-gravitante em dimensões mais baixas.

3.2 Problema em 1D

Analisemos inicialmente o problema da relaxação para os sistemas auto-gravitantes em uma dimensão. A escolha do sistema em uma dimensão provou ser muito útil para a compreensão da dinâmica estelar em aglomerados de galáxias bem como na análise de modelos cosmológicos [118, 119, 120, 121, 122, 123, 124, 125]. O modelo é constituído por N folhas de massa m no plano $y-z$, livres para se moverem ao longo do eixo x . Para simplificar os cálculos suporemos que todas as folhas têm a mesma massa $m = M/N$, onde M representa a massa total do sistema, de modo que no limite termodinâmico M permanece finito. Isto equivale à prescrição de Kac já anunciada no capítulo introdutório como necessária para manter a energia como uma quantidade extensiva. Rigorosamente no espaço tridimensional m representa a densidade superficial de massa do plano e M a densidade total de massa do sistema.

Por simplicidade definimos variáveis adimensionais reescalando massa, comprimentos, velocidades, o potencial, a densidade de massa e energia com relação a M , L_0 (uma escala de comprimento arbitrário), $V_0 = \sqrt{2\pi GML_0}$, $\psi_0 = 2\pi GML_0$, $\rho_0 = M/L_0$ and

$E_0 = MV_0^2 = 2\pi GM^2 L_0$, respectivamente. Todas estas escalas equivalem a tomarmos $G = M = 1$ e definirmos uma escala de tempo dinâmico

$$\tau_D^{1D} = (4\pi G \rho_0)^{-1/2}. \quad (3.5)$$

Dessa forma as partículas (folhas) interagem por meio do potencial em 1D que satisfaz a equação de Poisson:

$$\nabla^2 \psi^{1D}(x, t) = 2 \int f(x, v, t) dv, \quad (3.6)$$

É então, fácil demonstrar que uma partícula na origem com uma densidade de massa $\rho(x) = \delta(x)$ cria um potencial de longo alcance dado pela função de Green,

$$G^{1D}(x) = |x|. \quad (3.7)$$

Embora muito mais simples do que a gravitação real em 3D, esse modelo contém a essência do problema gravitacional, por dizer, a força de longo alcance entre as partículas. Outro ponto positivo no modelo está relacionado com o fato de que a interação entre as folhas não é singular, o que facilita suficientemente as simulações [126], ao mesmo tempo que contém a maior parte dos efeitos complicados do ponto de vista da ME de equilíbrio já evidenciados no capítulo anterior [2]. Como o potencial de interação é de longo alcance, dentro do que já foi discutido no capítulo anterior o sistema passa a ser descrito dinamicamente por meio da equação de Vlasov no limite termodinâmico.

Como a equação de Vlasov não tem um atrator global, por dizer, uma distribuição única para o estado estacionário, em geral as soluções são obtidas numericamente por meio de algoritmos sofisticados que envolvem a resolução da função de distribuição em uma grade, sendo a solução tão precisa quanto menor for o tamanho da grade utilizada para cada ponto do espaço de fase [104, 105]. Outras aproximações possíveis, ligadas à linearização da equação de Vlasov, não tem demonstrado sucesso na descrição desses sistemas [50, 127, 99]. Por outro lado, sabe-se que resolver a equação de Vlasov é totalmente equivalente a simular, via leis de Newton, a evolução dinâmica de um sistema N -corpos via dinâmica molecular [103]. Em particular, no limite termodinâmico os dois métodos coincidem exatamente. Em todos os modelos tratados nesta tese utilizaremos a dinâmica molecular para descrever a evolução dinâmica do sistema do modo como está detalhada no apêndice A.

Para um sistema unidimensional o hamiltoniano é simplesmente descrito por

$$\mathcal{H}^{1D}(x, p) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{m^2}{2} \sum_{i,j} |x_i - x_j|, \quad (3.8)$$

onde $m = 1/N$. Esse hamiltoniano juntamente com as equações de Hamilton define completamente a dinâmica [114]. Portanto, a aceleração em termos adimensionais que uma partícula na posição x sente devido à interação com todas as outras $N - 1$ partículas é dada simplesmente por,

$$\ddot{x} = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{x - x_i}{|x - x_i|}, \quad (3.9)$$

ou simplesmente,

$$\ddot{x} = \frac{N_{>}(x) - N_{<}(x)}{N}, \quad (3.10)$$

onde $N_{>}(x)$ e $N_{<}(x)$ representam o número de partículas à direita e à esquerda da posição x . Simular o sistema de acordo com (3.10) a princípio representaria um custo computacional de tempo que escalaria com N^2 . Contudo, se juntamente na dinâmica carregamos um vetor com os índices de cada partícula e mantemos este vetor ordenado a cada cálculo da aceleração, podemos simplificar a expressão para,

$$\ddot{x} = \frac{(N - i) - (i - 1)}{N} = \frac{N - 2i + 1}{N}, \quad (3.11)$$

onde i é o índice da partícula na posição x . Percebam que não há nenhuma aproximação ao se calcular a aceleração dessa maneira; a vantagem é puramente computacional no sentido que tornamos as simulações mais eficientes do ponto de vista do tempo de simulação. Por exemplo, o tempo típico que se leva para ordenar um vetor de tamanho N varia no máximo com $N \ln N$ [128].

Neste sentido, após um encontro entre duas partículas, ocorre simplesmente a mudança de índices e velocidades pois as partículas são consideradas indistinguíveis. Como entre as colisões a aceleração é constante a simulação é bem simples e as trajetórias podem ser obtidas exatamente, ou melhor, na precisão da máquina de computação. Simulamos numericamente a evolução dinâmica de um sistema de partículas que inicialmente estão distribuídas uniformemente nas posições x_i onde $x_i \in [-x_m : x_m]$ com velocidades $v_i \in [-v_m : v_m]$ ou seja, de acordo com

$$f_0(x, v) = \eta \Theta(x_m - |x|) \Theta(v_m - |v|) \quad (3.12)$$

onde $\eta = (4x_m v_m)^{-1}$.

Para efetuar cálculo da energia inicial precisamos encontrar o potencial que é solução da equação de Poisson (3.6) quando $f(x, v, 0) = f_0(x, v)$ ou seja,

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_{wb}^{1D}(x) = \begin{cases} \frac{1}{x_m} & \text{para } |x| \leq x_m \\ 2\delta(x) & \text{para } |x| \geq x_m \end{cases} \quad (3.13)$$

onde $\psi_{wb}^{1D}(0) = \psi_{0wb}^{1D}$ e $\psi'_{wb}^{1D}(0) = 0$. A solução pode ser obtida facilmente,

$$\psi_{wb}^{1D}(x) = \begin{cases} \frac{x^2}{2x_m} + \frac{x_m}{2} & \text{para } |x| \leq x_m \\ |x| & \text{para } |x| \geq x_m \end{cases} \quad (3.14)$$

Em seguida utilizando a definição da energia total (2.28) determinamos a energia inicial do sistema,

$$\mathcal{E}_0 = v_m^2/6 + 1/3. \quad (3.15)$$

onde sem perda de generalidade assumimos que $x_m = 1$.

3.2.1 Equilíbrio Termodinâmico: N finito

Se o sistema tem um número finito de partículas porém grande, após um tempo suficientemente grande, o sistema deve relaxar para um estado de equilíbrio termodinâmico onde a função de distribuição é dada exatamente pela distribuição de Maxwell-Boltzmann (2.7) sendo que neste caso,

$$n(x) = e^{-\beta\omega(x)} \quad (3.16)$$

onde $\omega(x)$ o potencial de força média que deveria incluir os termos de correlações entre as partículas [129]. Para um sistema gravitacional de massa total M as correlações tornam-se desprezíveis à medida em que N se torna grande, dessa forma vamos assumir que $\omega(x) \approx \psi(x)$. Desta forma substituindo (3.16) em (2.7) e (3.6), obtemos a equação de Poisson-Boltzmann para o sistema na forma adimensional

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_{eq}^{1D}(x) = \sqrt{\frac{8\pi}{\beta}} C e^{-\beta\psi_{eq}^{1D}(x)}. \quad (3.17)$$

com as condições de contorno onde $\psi_{eq}^{1D}(0) = \psi_{0_{eq}}^{1D}$ e $\psi'_{eq}^{1D}(0) = 0$. A solução para esta equação é dada simplesmente por

$$\psi_{eq}^{1D}(x) = \psi_{0_{eq}}^{1D} - \frac{2}{\beta} \ln[\operatorname{sech}(\frac{\beta x}{2})] \quad (3.18)$$

onde pela equação para a conservação da energia (2.28) encontramos que

$$\beta = \frac{1}{2\mathcal{E}_0}(3 - 2 \ln 2). \quad (3.19)$$

Desta forma, o problema está totalmente resolvido para o equilíbrio no limite de campo médio (Fig. 3.1) e para comparar com os resultados das simulações numéricas definimos como $N(x)$ o número de partículas entre $[x, x + dx]$,

$$N(x) = N \int dv f_{MB}(x, v) = N \frac{\beta}{4} \operatorname{sech}^2(\frac{\beta x}{2}) \quad (3.20)$$

e de maneira similar definimos o número de partículas entre $[v, v + dv]$ por,

$$N(v) = N \int dx f_{MB}(x, v) = N \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} e^{-\beta v^2/2}. \quad (3.21)$$

3.2.2 Limite Termodinâmico: N infinito

O número ou razão virial para o sistema em 1D é dado simplesmente por $\mathcal{R} = 2K/V$ onde K representa a energia cinética e V a energia potencial, apêndice C. Assim, para uma distribuição inicial uniforme teremos que $\mathcal{R}_0 = v_m^2$. Acontece que no limite em que o número de partículas é muito grande o sistema deve ficar aprisionado em um estado quasi-estacionário que depende fortemente da condição inicial. Para tanto, vamos analisar o sistema em duas situações distintas: uma quando $\mathcal{R}_0 = 1$ e outra quando $\mathcal{R}_0 \neq 1$.

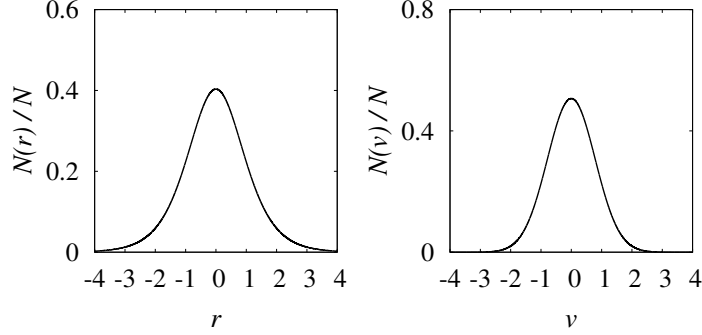


Figura 3.1 Predição teórica da distribuição de Maxwell-Boltzmann para o estado de equilíbrio no sistema em uma dimensão (3.20) e (3.21).

3.2.2.1 Relaxação Violenta

Se o sistema inicialmente se encontra na condição virial, ou seja, quando $\mathcal{R}_0 = 1$ conforme o resultados preliminares [83] esperamos que o estado estacionário seja descrito pela teoria da relaxação violenta onde a função de distribuição é dada simplesmente pela (2.31). Neste caso podemos obter o potencial $\psi(x)$ para o estado estacionário resolvendo a equação de Poisson (3.6),

$$\frac{d^2\psi_{lb}^{1D}(x)}{dx^2} = -\sqrt{\frac{8\pi}{\beta}}\eta Li_{1/2}[-e^{-\beta(\psi_{lb}^{1D}(x)-\mu)}] \quad (3.22)$$

com condições de contorno dadas por $\psi_{lb}^{1D}(0) = \psi_{0lb}^{1D}$ e $\psi_{lb}^{1D}(x=0) = 0$, onde $Li_n(x)$ representa a n -ésima função poli-logarítmica de x [130].

A solução para esta equação pode ser obtida numericamente pelo menos de duas maneiras distintas, apêndice B.

Comparando a solução numérica com simulações percebemos um bom acordo, o que mostra que na condição virial o qSS parece corresponder ao previsto pela teoria da relaxação violenta (Fig. 3.2).

Por outro lado, se o sistema inicialmente não satisfaz à condição virial, ou seja, $\mathcal{R}_0 \neq 1$ o qSS apresenta uma separação de fases onde há predominância de um núcleo central permeado por um halo constituído por partículas mais energéticas, conforme Fig. 3.3. Neste caso, como o sistema não obedece inicialmente à condição virial há um desequilíbrio entre a energia cinética K e potencial V levando o sistema a desenvolver oscilações macroscópicas.

3.2.2.2 Equação de Envelope

Com o objetivo de mensurar essas oscilações macroscópicas definimos um tamanho característico para o sistema, o raio de envelope do sistema $x_e \equiv \sqrt{3 \langle x^2 \rangle}$. Derivando x_e

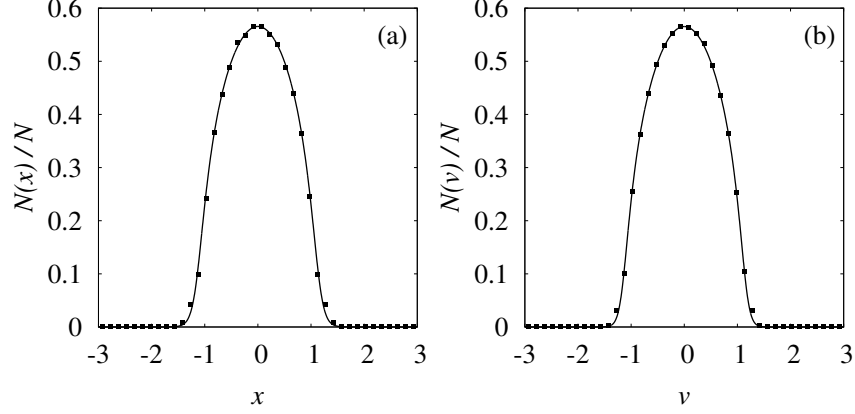


Figura 3.2 Distribuição em posição (a) e velocidade (b) para o sistema inicialmente na condições virial $\mathcal{R}_0 = 1$. Os pontos são resultados da simulação dinâmica para o hamiltoniano dado por (3.8) e a linha cheia o resultado previsto pela teoria da relaxação violenta (2.31).

duas vezes com respeito ao tempo encontramos que,

$$\ddot{x}_e = \frac{3 \langle x\ddot{x} \rangle}{x_e} + \frac{3 \langle \dot{x}^2 \rangle}{x_e} - \frac{9 \langle x\dot{x} \rangle^2}{x_e^3}. \quad (3.23)$$

Para simplificar o primeiro termo, supomos que as oscilações da densidade de massa são suaves de modo que a distribuição permanece próxima da distribuição inicial. Nessas condições podemos assumir em primeira aproximação que o potencial oscilante do envelope $\psi_e^{1D}(x, t)$ mantenha o funcional dado pela Eq. (3.14) ou seja,

$$\psi_e^{1D}(x, t) = \begin{cases} \frac{x^2}{2x_e(t)} + \frac{x_e(t)}{2} & \text{para } |x| \leq x_e(t) \\ |x| & \text{para } |x| \geq x_e(t) \end{cases} \quad (3.24)$$

uma vez que,

$$f_e(x, v, t) = \eta_e \Theta(x_e(t) - |x|) \Theta(v_m - |v|) \quad (3.25)$$

com $\eta_e^{1D} = [4x_e(t)v_m]^{-1}$. Por fim encontramos nesse caso que,

$$\begin{aligned} \langle x\ddot{x} \rangle &= -\left\langle x \frac{d}{dx} \psi_e^{1D}(x, t) \right\rangle \\ &= -\int x \frac{d}{dx} \psi_e^{1D}(x, t) f_e(x, v, t) dx dv \\ &= -\frac{1}{2x_e(t)} \int_{-x_e(t)}^{x_e(t)} \frac{x^2}{x_e} dx. \end{aligned} \quad (3.26)$$

e que portanto,

$$\langle x\ddot{x} \rangle = -\frac{x_e(t)}{3}. \quad (3.27)$$

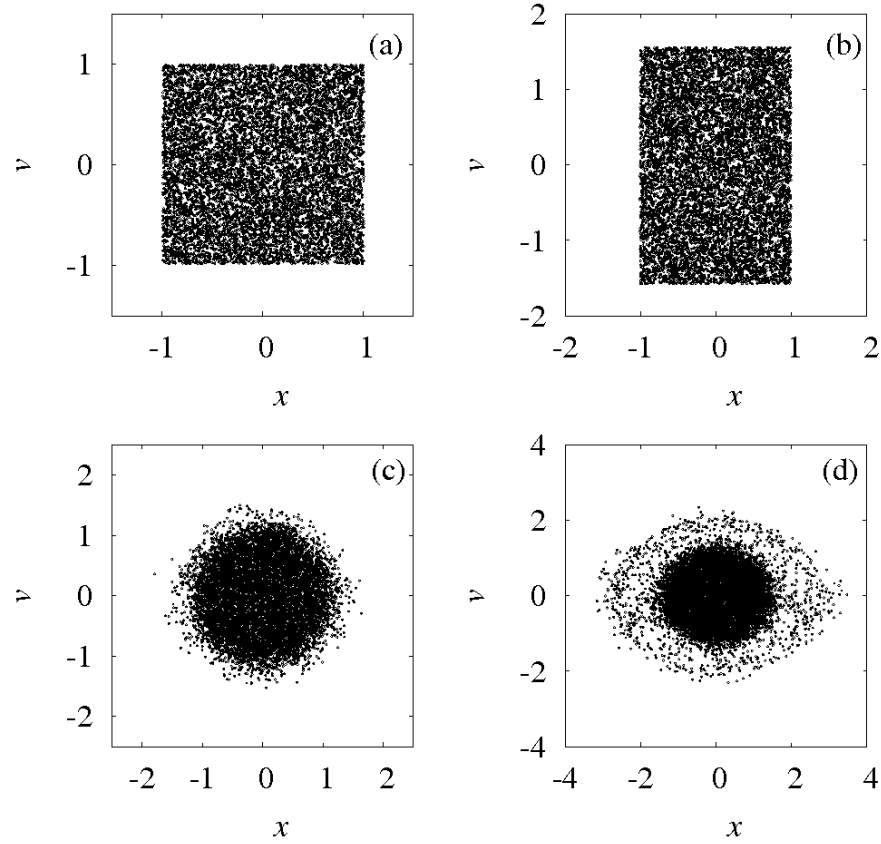


Figura 3.3 Espaço de fase inicial (a, b) e final ($t=1000$) (c, d) de $N = 10^4$ partículas distribuídas inicialmente com $\mathcal{R}_0 = 1$ (a) e $\mathcal{R}_0 = 2,5$ (b). O estado estacionário é notavelmente distinto se o sistema desenvolve ou não oscilações. Em particular nota-se uma separação de fases com a formação de um núcleo e o halo.

O segundo termo em (3.23) envolve somente valores médios que, para tempos curtos, devem permanecer próximos dos valores iniciais para a distribuição f_0 ,

$$\langle \dot{x}^2 \rangle = \frac{1}{2v_m} \int_{-v_m}^{v_m} \dot{x}^2 d\dot{x} = \frac{v_m^2}{3} \quad (3.28)$$

$$\langle x\dot{x} \rangle = \frac{1}{4x_mv_m} \int_{-x_m}^{x_m} x dx \int_{-v_m}^{v_m} \dot{x} d\dot{x} = 0$$

Após essas aproximações a equação de envelope reduz-se para,

$$\ddot{x}_e(t) = \frac{\mathcal{R}_0}{x_e(t)} - 1, \quad (3.29)$$

onde $\mathcal{R}_0 = \frac{2K_0}{U_0} = v_m^2$. Desta forma se $x_e(0) = x_m = 1$ e $\mathcal{R}_0 = 1$ então $\ddot{x}_e(t) = 0$, e

comprovamos então a premissa de que se o sistema não desenvolve oscilações coletivas ele encontra-se na condição virial e vice-versa.

Comparamos então x_e com os dados obtidos da dinâmica molecular de N -corpos onde percebemos um bom acordo, especialmente para tempos curtos (Fig. 3.4).

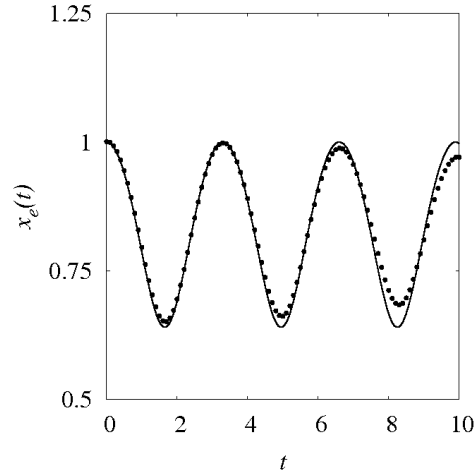


Figura 3.4 Evolução do envelope para $\mathcal{R}_0 = 0,5$. A linha contínua representa a previsão teórica da (3.29) e os pontos o resultado da simulação de N -corpos.

3.2.2.3 Modelo de Partícula Teste

No limite termodinâmico quando as partículas interagem por forças de longo alcance esperamos que a dinâmica seja dominada por efeitos de campo médio ao invés de colisões binárias. Neste sentido vamos analisar a dinâmica de partículas teste inicialmente localizadas nas posições $x_i^0 \in [-1, 1]$ com velocidades $v_i^0 \in [-v_m : v_m]$ com $v_m = \sqrt{\mathcal{R}_0}$. A dinâmica dessa partícula obedece a,

$$\ddot{x}_i^0(t) = \begin{cases} -\frac{x_i^0(t)}{x_e(t)} & \text{para } |x_i^0(t)| \leq x_e(t) \\ -\text{sgn}[x_i^0(t) - x_e(t)] & \text{para } |x_i^0(t)| \geq x_e(t) \end{cases} \quad (3.30)$$

onde $x_e(t)$ é dado por (3.29) e sgn representa a função sinal [131].

Integramos as equações para 15 partículas teste usando a mesma metodologia empregada na dinâmica de N -corpos. Plotamos as saídas das posições e velocidades de todas as partículas quando $x_e(t)$ atinge seu valor mínimo (seções de Poincaré). Para isso determinamos numericamente o período de oscilação do envelope (3.29) e em seguida plotamos as saídas das partículas teste nesse período.

Analisando as seções de Poincaré, verificamos nos casos onde $\mathcal{R}_0 \neq 1$ o surgimento de uma ilha de ressonância (Fig. 3.5) que também pode ser vista para tempos curtos na dinâmica completa de N -corpos do sistema (Fig 3.6). Tal ilha de ressonância está

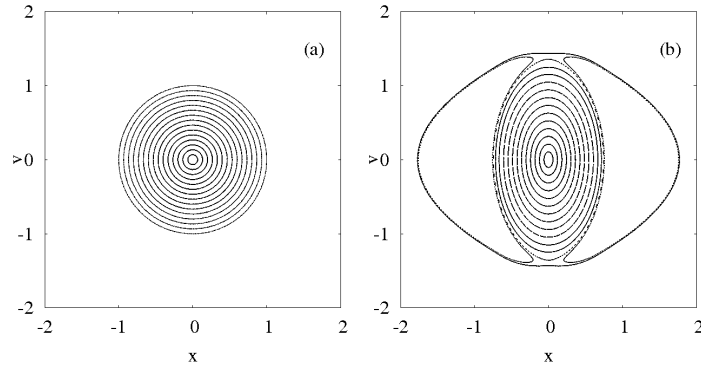


Figura 3.5 Seções de Poincaré para $\mathcal{R}_0 \approx 1$ (a) e $\mathcal{R}_0 = 0,5$ (b). Verifica-se em (a) a formação de uma única ilha de ressonância enquanto em (b) a formação de duas ilhas de ressonância.

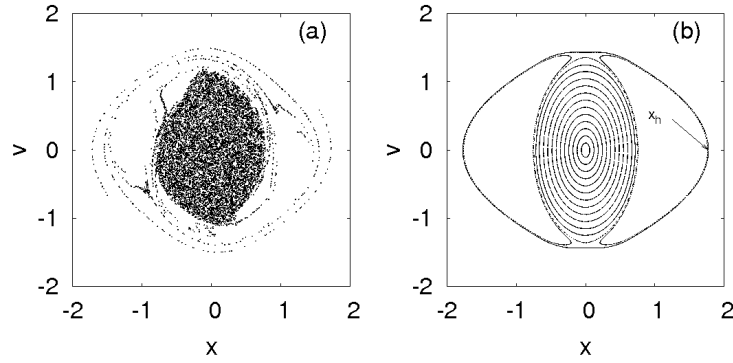


Figura 3.6 Espaço de fase para um sistema inicialmente com $\mathcal{R}_0 = 0,5$ em $t=7$ (a) e a seção de Poincaré obtida pela dinâmica de partículas teste para $\mathcal{R}_0 = 0,5$ (b). Percebe-se que o método das partículas teste permite determinar a máxima energia ϵ_h que uma partícula na dinâmica real de N -corpos pode obter. Nesse caso em particular $\epsilon_h = |x_h|$ sendo x_h a máxima posição atingida pela partícula teste.

associada com o surgimento da interação tipo onda-partícula no sistema [132, 133, 134]. Dessa forma uma partícula no sistema real de N -corpos entra em ressonância com as ondas de densidade gerada pelas outras $N - 1$ partículas e na condição ressonante pode ganhar energia suficiente para atingir regiões mais energéticas no espaço de fase. Tais regiões não poderiam ser atingidas se o sistema estivesse inicialmente na condição virial.

Nesse sentido entendemos que o comportamento não ergódico observado em sistemas com interações de longo alcance possa, de alguma maneira, estar relacionado com o surgimento da interação tipo onda-partícula no sistema. A descrição dessa interação para tempos curtos pode ser facilmente identificada na equação de envelope (3.29). É evidente que a equação de envelope não corresponde a uma boa aproximação para tempos longos onde efeitos não lineares passam a ser relevantes. Nesse sentido torna-se fundamental

o conhecimento da função completa de distribuição. A informação relevante que conseguimos obter com a dinâmica das partículas teste está relacionada principalmente com a determinação das órbitas mais energéticas do espaço de fase e portanto a maior energia que uma partícula pode receber, energia do halo ϵ_h .

3.2.2.4 Distribuição Núcleo-Halo

O teorema de Jeans estabelece que,

“Qualquer solução estacionária da equação de Vlasov depende das coordenadas do espaço de fase através de integrais de movimento do potencial dado, e qualquer função das integrais de movimento produz uma solução estacionária da equação de Vlasov” [93].

Assim, qualquer função de energia é uma solução para a equação de Vlasov. Em particular, a distribuição de Maxwell-Boltzmann (MB) é também uma solução estacionária da equação de Vlasov. No entanto, é importante lembrar que MB não constitui um atrator global na dinâmica de Vlasov — nesse sentido uma distribuição inicial arbitrária de partículas não precisa necessariamente convergir para a distribuição MB, como acontece para os sistemas controlados por forças de curto alcance.

Tendo por base as propriedades da equação de Vlasov no espaço de fase vamos procurar fornecer um possível *Ansatz* para a distribuição do estado estacionário. Se a função de distribuição se comporta como um fluido incompressível isto significa que a densidade no espaço de fase não pode exceder em nenhum instante o valor inicial f_0 , $f(x, v, t) \leq \eta$. Diferente do que ocorre no problema em 3D aqui as partículas não podem escapar para o infinito. Antes, pela dinâmica das partículas teste sabemos que partículas que entram em ressonância no sistema podem escapar da parte central do sistema por ganhar grandes quantidades de energia. Essas partículas atingem regiões mais energéticas do espaço de fase ficando aprisionadas em ilhas de ressonância. Assumimos portanto que as partículas permanecem aprisionadas no espaço de fase formando um tênue halo.

Por outro lado, como a dinâmica do sistema é conservativa, a energia retirada pelas partículas ressonantes acaba por resfriar o núcleo central até um mínimo de energia. Tal mínimo de energia não pode ser um mínimo do potencial pois nesse caso a densidade no espaço de fase excederia o valor inicial. Esse processo de esfriamento acontece ao mesmo tempo em que as oscilações do envelope $x_e(t)$ são amortecidas pela ejeção de partículas para o halo, processo similar ao amortecimento de Landau [107, 108]. Dessa maneira, quando o núcleo atinge um mínimo na energia livre ² as oscilações devem saturar e o sistema atinge o estado estacionário, qSS. Dessa maneira, propomos uma aproximação para a função de distribuição no qSS.

De maneira similar ao que acontece com um gás de Fermi completamente degenerado ou seja, em $T = 0$ para férmions em equilíbrio, o núcleo deve ser bem descrito por uma

²O sentido de energia livre nesse ponto não deve ser confundido com a energia livre no sentido termodinâmico.

distribuição do tipo Fermi-Dirac com temperatura $T = 0$ ou seja

$$\bar{f}_{nucleo}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \eta \Theta(\epsilon_F - \epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{v})) \quad (3.31)$$

onde η representa a densidade inicial e ϵ_F a energia de Fermi do sistema. Por outro lado assumimos que o halo deva ser – em primeira aproximação – uniformemente populado e que portanto a distribuição para o halo seja,

$$\bar{f}_{halo}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \chi \Theta(\epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{v}) - \epsilon_F) \Theta(\epsilon_h - \epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{v})), \quad (3.32)$$

onde χ a degenerescência do halo.

Essa é portanto a motivação física que nos leva a propor a distribuição tipo núcleo halo descrita em (2.32), e que, portanto, permite-nos determinar totalmente o qSS simplesmente resolvendo a equação de Poisson para o sistema. Nesse caso,

$$\frac{d^2 \psi_{ch}^{1D}}{dx^2} = 2\sqrt{2} \begin{cases} (\eta - \chi) \sqrt{\epsilon_F - \psi_{ch}^{1D}} + \chi \sqrt{\epsilon_h - \psi_{ch}^{1D}} & \text{para } \psi_{ch}^{1D} \leq \epsilon_F, \\ \chi \sqrt{\epsilon_h - \psi_{ch}^{1D}} & \text{para } \epsilon_F \leq \psi_{ch}^{1D} \leq \epsilon_h, \\ 0 & \text{para } \psi_{ch}^{1D} \geq \epsilon_h, \end{cases} \quad (3.33)$$

com condições de contornos dadas por $\psi_{ch}^{1D}(0) = \psi_{0ch}^{1D}$ e $\psi_{ch}^{1D}(0) = 0$. Os parâmetros χ e ϵ_F , por sua vez, são determinados de maneira auto-consistente através da solução numérica de (3.33) com os vínculos para conservação de energia e número de partículas (2.28).

Comparamos o número de partículas (3.20 e 3.21) obtidos pela solução (3.33) para a distribuição núcleo-halo (2.32) com os dados da simulação numérica (Fig. 3.7). Percebemos um bom acordo entre a teoria e simulação notando que nenhum parâmetro de ajuste foi utilizado. O qSS é completamente distinto do estado de equilíbrio sendo inclusive a distribuição em velocidades diferente da distribuição (MB). O qSS permanece por um tempo $\tau_x = \tau_D^{1D} N^\gamma$, onde $\gamma \geq 1$. Ainda não verificamos numericamente como ocorre essa divergência mas alguns resultados teóricos recentes apontam que $\gamma = 2$ [135, 136].

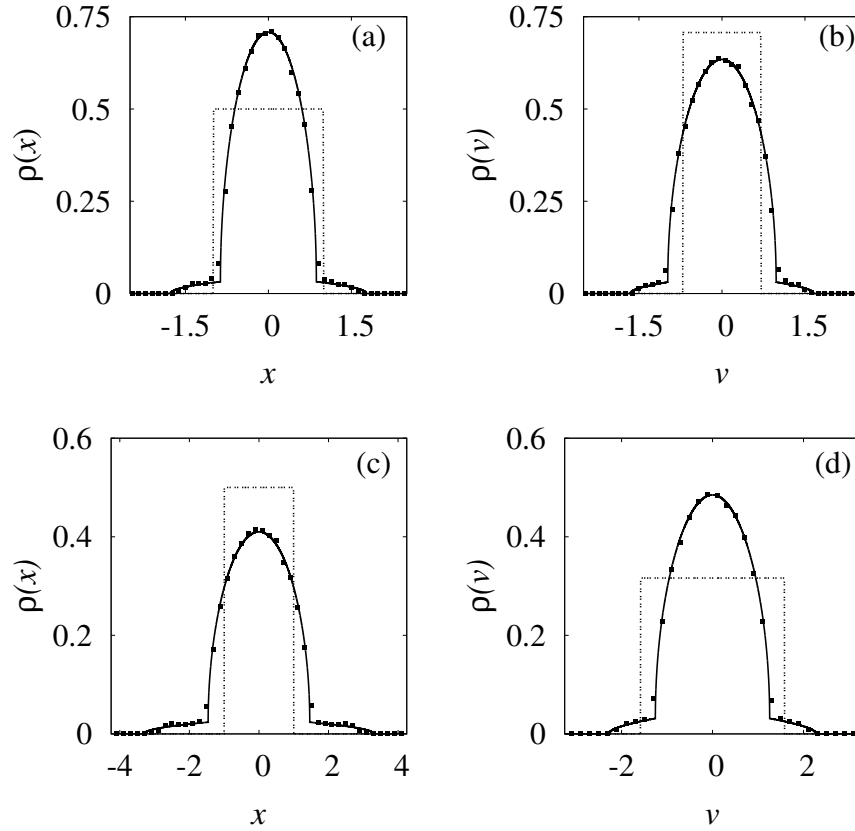


Figura 3.7 Distribuições finais em posição (a) e velocidade (b), para distribuição inicial do tipo (water-bag) com $\mathcal{R}_0 = 0,5$, em $t=1000 \tau_D$ e (c) e (d) são as distribuições finais para o caso em que $\mathcal{R}_0 = 2,5$. As linhas pontilhadas representam as distribuições iniciais, os pontos os resultados das simulações de N -corpos e, a linha cheia representa o resultado previsto pela teoria (2.32).

3.3 Problema em 2D

Analisemos agora o problema da relaxação em duas dimensões. Nesse caso, o sistema consiste em N partículas com a massa total M em um espaço bidimensional [11, 137, 12, 94, 96]. De maneira similar ao que fizemos no caso anterior distribuimos em $t = 0$ todas as partículas uniformemente no espaço de fase e depois deixamos que o sistema relaxe dinamicamente para o estado final. Nesse modelo cada uma das N partículas tem massa $m = M/N$ e, de maneira similar ao que ocorre com o sistema em $1D$, é conveniente definir variáveis adimensionais reescalando, comprimentos, velocidade, o potencial e a energia com relação a L_0 (uma escala de comprimento arbitrário), $V_0 = \sqrt{2GM}$, $\psi_0 = 2GM$ e $E_0 = MV_0^2 = 2GM^2$, respectivamente, onde G representa a constante gravitacional. Esse reescalamento equivale a considerarmos $M = G = 1$, e portanto $m = 1/N$, e definirmos

um tempo dinâmico,

$$\tau_D^{2D} = L_0/\sqrt{2GM} . \quad (3.34)$$

No espaço tridimensional o sistema corresponde a linhas com densidade de massa m . O nosso objetivo é igualmente o de calcular a função de distribuição de uma partícula $f(r, v)$ após o estado estacionário ser atingido através de um processo de relaxação. Vamos restringir nossa atenção para os sistemas azimutalmente simétricos. Neste caso o potencial gravitacional deve satisfazer a equação de Poisson que na forma adimensional é dada simplesmente por,

$$\nabla^2 \psi^{2D}(r, t) = 2\pi \int f(r, \mathbf{v}; t) d^2\mathbf{v} \quad (3.35)$$

Para uma partícula localizada na origem,

$$\rho(r) = \delta(r) , \quad (3.36)$$

a solução de Green para (3.35) é dada simplesmente por

$$G(r) = \ln |r| \quad (3.37)$$

Como consideramos um sistema com simetria azimutal é fácil ver que como o potencial não depende do ângulo os momentos $p_{\theta_i} = mr_i^2 \dot{\theta}_i$ são constantes. Dessa forma o hamiltoniano pode ser escrito como,

$$\mathcal{H}^{2D}(r_i, \theta_i, p_{r_i}, p_{\theta_i}) = \sum_{i=1}^N \frac{p_{r_i}^2}{2m} + \frac{p_{\theta_i}^2}{2mr_i^2} + \frac{m^2}{2} \sum_{i,j}^N \ln |r_i - r_j| \quad (3.38)$$

onde assumimos que $m = 1/N$.

Por esse hamiltoniano a aceleração que uma partícula i no sistema sente devido à interação com as outras $N - 1$ partículas é dada simplesmente por,

$$\ddot{r}_i = \frac{l_{\theta_i}^2}{r_i^3} - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{1}{|r_i - r_j|} \quad (3.39)$$

onde $l_{\theta_i} = (r^2 \dot{\theta})_i$. Como estamos interessados em analisar o estado estacionário gostaríamos de evitar os efeitos colisivos. Para isso, é fácil verificar que no limite em que o número de partículas é muito grande a potencial de interação pode ser calculado utilizando a simetria do sistema, que será melhor discutido no apêndice A. Nessa aproximação as partículas correspondem a cascas cilíndricas com densidade linear de massa $m = 1/N$ onde uma partícula na posição r_i sente um potencial de interação devido à soma das massas m_{eff} das partículas com raio $r_j < r_i$. Ou seja, o hamiltoniano efetivo do sistema \mathcal{H}_{eff}^{2D} passa a ser dado simplesmente por,

$$\mathcal{H}_{eff}^{2D}(r_i, \theta_i, p_{r_i}, p_{\theta_i}) = \sum_{i=1}^N \frac{p_{r_i}^2}{2m} + \frac{p_{\theta_i}^2}{2mr_i^2} + m_{eff}(r_i) \cdot m \ln r_i \quad (3.40)$$

$$m_{eff}(r_i) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \Theta(r_i - r_j) \quad (3.41)$$

Dessa maneira, a aceleração efetiva $\ddot{r}_{eff}(r_i)$ sentida pela partícula na posição r_i é dada simplesmente por,

$$\ddot{r}_{eff}(r_i) = \frac{l_{\theta_i}^2}{r_i^3} - \frac{m_{eff}(r_i)}{r_i} \quad (3.42)$$

Outra grande vantagem deste método está ligada ao fato de que o tempo de simulação vai depender exclusivamente do tempo de ordenamento de um vetor de tamanho N , conforme já discutido no capítulo anterior [128].

Como a dinâmica relevante acontece no subespaço (r, p_r) do espaço de fase completo do sistema distribuimos N partículas aleatoriamente no espaço de configurações nas posições $r_i \in [0, r_m]$ com velocidades $v_i \in [0, v_m]$, onde $v_i = \sqrt{v_{r_i}^2 + (r_i \dot{\theta}_i)^2}$. Essa distribuição inicial é uniforme, ou seja,

$$f_0(r_m, v_m) = \eta \Theta(r_m - r) \Theta(v_m - v) \quad (3.43)$$

onde $\eta = (\pi^2 r_m^2 v_m^2)^{-1}$.

O potencial ψ_{wb}^{2D} associado com essa distribuição inicial pode ser obtido simplesmente pela equação de Poisson (3.35),

$$\frac{d^2 \psi_{wb}^{2D}(r)}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\psi_{wb}^{2D}(r)}{dr} = \begin{cases} 2/r_m^2 & \text{para } r \leq r_m \\ 2\pi\delta(r) & \text{para } r > r_m \end{cases} \quad (3.44)$$

com contornos dados $\psi_{wb}^{2D}(0) = \psi_{0wb}^{2D}$ e $\psi_{wb}^{2D}(0) = 0$. A solução pode ser obtida facilmente,

$$\psi_{wb}^{2D}(r) = \begin{cases} \frac{r^2 - r_m^2}{2r_m^2} + \ln(r_m) & \text{para } r \leq r_m \\ \ln(r) & \text{para } r \geq r_m \end{cases} \quad (3.45)$$

Em seguida utilizando a definição da energia total em termos da função de distribuição (2.28) determinamos a energia inicial do sistema,

$$\mathcal{E}_0 = v_m^2/4 - 1/8, \quad (3.46)$$

onde sem perda de generalidade assumimos que $r_m = 1$.

3.3.1 Equilíbrio Termodinâmico: N finito

Como discutimos na introdução da tese, se o sistema tem um número finito de partículas, após um tempo suficientemente grande $\tau_{\times}(N)$, ele deve relaxar para o equilíbrio termodinâmico com a distribuição de Maxwell-Boltzmann (MB) (2.7). Resolver o problema significa encontrar o potencial ψ_{eq}^{2D} que obedece à equação de Poisson,

$$\frac{d^2 \psi_{eq}^{2D}(r)}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\psi_{eq}^{2D}(r)}{dr} = \frac{4\pi^2 C}{\beta} e^{-\beta \psi_{eq}^{2D}(r)} \quad (3.47)$$

onde C é uma constante de normalização, $\beta = 1/T$ é o multiplicador de Lagrange usado para conservar a energia total.

A solução para esta equação é [8, 138]

$$\psi_{eq}^{2D}(r) = \frac{2}{\beta} \ln \left(\lambda^2 + \frac{\pi^2 C}{2\lambda^2} r^2 \right). \quad (3.48)$$

Para valores grandes de r o potencial deve crescer como

$$\lim_{r \rightarrow \infty} [\psi^{2D}(r) - \ln(r)] = 0, \quad (3.49)$$

isso requer que $\beta = 4$ e $\lambda^2 = \pi^2 C/2$. Com estes valores, a função de distribuição (2.7) automaticamente satisfaz os vínculos de conservação de energia e número de partículas (2.28).

Tomando-se a integral da energia em (2.28) com $\psi(r)$ dado por (3.48), obtemos que

$$\lambda^2 = e^{2(2\mathcal{E}_0 - 1)}. \quad (3.50)$$

definindo assim a solução de equilíbrio termodinâmico para o sistema no limite de N grande porém finito, ou seja, na aproximação de campo médio. O passo seguinte na solução do problema está naturalmente na comparação da solução analítica com os resultados da dinâmica molecular de N -corpos (apêndice A).

Para comparar os resultados numéricos com a solução analítica computamos a densidade de número de partícula entre $[r, r + dr]$

$$N(r) = 2\pi N r \int d^2\mathbf{v} f_{MB}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \frac{2N\lambda^2 r}{(\lambda^2 + r^2)^2} \quad (3.51)$$

e a densidade de número de partículas com velocidades entre $[v, v + dv]$,

$$N(v) = 2\pi N v \int d^2\mathbf{r} f_{MB}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = 4Nv e^{-2v^2}. \quad (3.52)$$

A Fig. 3.8 mostra um bom acordo na comparação entre a teoria e a simulação; contudo é importante salientar que o tempo de simulação numérica até o sistema atingir o equilíbrio termodinâmico foi da ordem de um milhão de tempo dinâmicos para $N = 10000$. Dessa forma, enquanto o sistema não atinge o tempo de passagem para o equilíbrio $\tau_{\times}(N)$, ele permanece aprisionado em estados quasi-estacionários onde a função de distribuição de uma partícula é em geral bem diferente da distribuição de MB conforme vimos no sistema em uma dimensão.

3.3.2 Limite Termodinâmico: N infinito

Vamos analisar, de maneira similar ao que fizemos com o sistema em uma dimensão a evolução dinâmica em duas situações distintas: quando a distribuição inicial obedece à condição virial $\mathcal{R}_0 = 1$ ou não $\mathcal{R}_0 \neq 1$. A condição virial para o sistema em duas dimensões é dada simplesmente por $\langle v^2 \rangle = 1/2$ no limite termodinâmico, sendo o número virial definido por $\mathcal{R} = (2 \langle v^2 \rangle)^{1/2}$ (apêndice C).

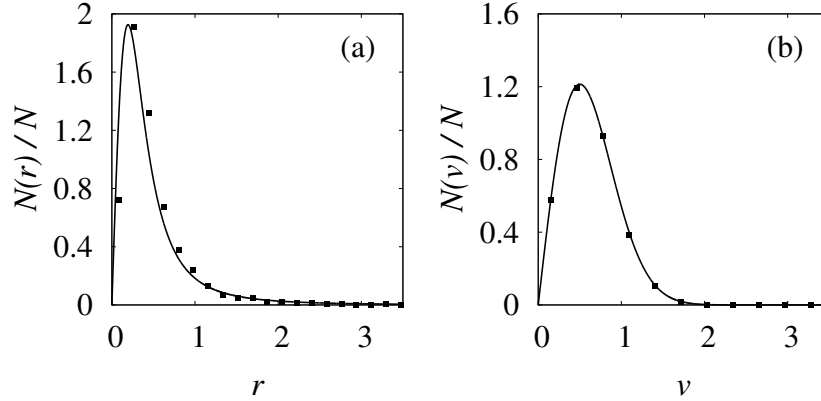


Figura 3.8 Distribuição em posição (a) e em velocidade (b) para um sistema com $\mathcal{E}_0 = -0,0433673$. A linha cheia corresponde a predição teórica obtida usando a função de distribuição (4.25) e os pontos são resultado da simulação para $N = 10000$ partículas.

3.3.2.1 Relaxação Violenta

Se o sistema inicialmente obedece à condição virial, esperamos que da mesma forma como no sistema unidimensional o estado estacionário seja descrito pela função de distribuição da teoria baseada na relaxação violenta (2.31). Neste caso resolver o problema significa resolver a equação de Poisson,

$$\frac{d^2 \psi_{lb}^{2D}(r)}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\psi_{lb}^{2D}(r)}{dr} = \frac{4\pi^2 \eta}{\beta} \ln[1 + e^{-\beta(\psi_{lb}^{2D}(r) - \mu)}] \quad (3.53)$$

com condição de contorno $\psi_{lb}^{2D}(0) = \psi_{0lb}^{2D}$ e $\psi'_{lb}^{2D}(0) = 0$. Os parâmetros β e μ são determinados de maneira auto consistente através das equações de vínculo (2.28) e $\eta = 1/(\pi^2 v_m^2)$ representa a densidade inicial no espaço de fase. A solução dessa equação é obtida numericamente conforme demonstrado no apêndice B.

Uma vez determinados $\psi_{lb}^{2D}(r)$, β e μ podemos comparar os resultados teóricos com a simulação de N -corpos. Para isso, computamos a densidade de número de partícula entre $[r, r + dr]$

$$N(r) = 2\pi N r \int d^2 v f_{lb}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \frac{4Nr}{\beta v_m^2} \ln[1 + e^{-\beta(\psi_{lb}^{2D}(r) - \mu)}] \quad (3.54)$$

e a densidade de número de partículas com velocidades entre $[v, v + dv]$,

$$N(v) = 2\pi N v \int d^2 r f_{lb}(\mathbf{r}, \mathbf{v}). \quad (3.55)$$

Comparando com as simulações percebemos um excelente acordo entre a teoria e a simulação (Fig. 3.9). Por outro lado se inicialmente a condição virial não é satisfeita ex-

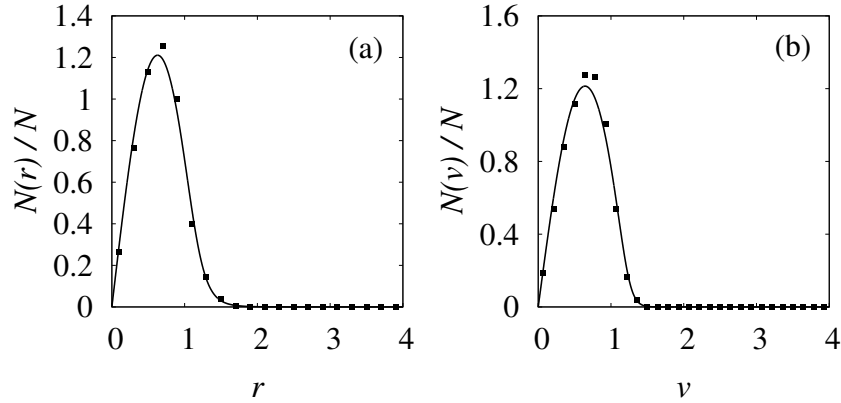


Figura 3.9 Distribuição em posição (a) e velocidade (b) para um sistema que satisfaz inicialmente à condição virial. A linha contínua representa os resultados previstos pela teoria da relaxação violenta (2.31) enquanto que os pontos são resultados da simulação dinâmica para $N = 10000$ partículas no tempo $t = 1000$.

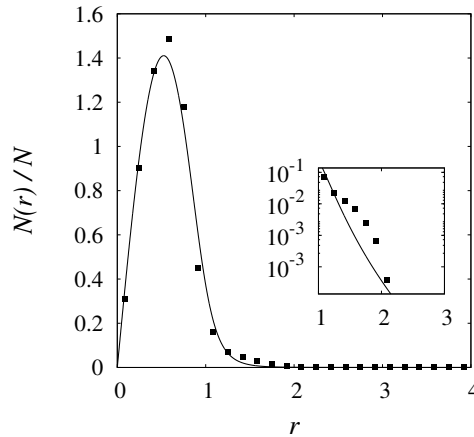


Figura 3.10 Distribuição em posição (a) para um sistema auto-gravitante com distribuição inicial próxima da condição virial, $\mathcal{R}_0 = 0,91$; a linha contínua representa a previsão teórica da teoria da relaxação violenta Eq. (2.31) enquanto que os pontos são resultados da simulação dinâmica de $N = 10000$ partículas.

atamente percebemos o surgimento de um desvio na cauda da distribuição (Fig. 3.10). Supomos que se o sistema se afasta muito da condição virial há o surgimento de ondas de densidade no sistema devido ao desequilíbrio entre energia cinética e potencial inicial de modo que a interação dessas ondas com as partículas resulta em um comportamento não ergódico para o sistema. Nesse caso algumas partículas ganham grande quantidade de

energia atingindo assim regiões mais energéticas do espaço de fase o que de certa maneira impossibilita o processo de mistura.

3.3.2.2 Equação de Envelope

Para analisar esse comportamento, de maneira similar ao que fizemos para o sistema em uma dimensão, definimos $r_e(t) = \sqrt{2\langle \mathbf{r} \cdot \mathbf{r} \rangle}$ como envelope da distribuição de massa que obviamente varia no tempo para um distribuição não estacionária. Em seguida derivamos duas vezes com relação ao tempo,

$$\ddot{r}_e(t) = \frac{2\langle \mathbf{r} \cdot \ddot{\mathbf{r}} \rangle}{r_e(t)} + \frac{2\langle \dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} \rangle}{r_e(t)} - \frac{4\langle \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{r}} \rangle^2}{r_e^3(t)} \quad (3.56)$$

que podemos reescrever como,

$$\ddot{r}_e(t) = \frac{2 \langle \mathbf{r} \cdot \ddot{\mathbf{r}} \rangle}{r_e(t)} + \frac{\varepsilon^2(t)}{r_e^3(t)} \quad (3.57)$$

onde

$$\varepsilon^2(t) \equiv 4 \left(\langle \mathbf{r} \cdot \mathbf{r} \rangle \langle \dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} \rangle - \langle \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{r}} \rangle^2 \right) \quad (3.58)$$

é conhecido como “emitância” (emittance). A emitância é um parâmetro importante na física de feixes de partículas carregadas, e está relacionada com a área ocupada pelo sistema de partículas no espaço de fase [21] e, diferente do caso unidimensional, em 2D o termo $\langle \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{r}} \rangle$ pode ser simplificado utilizando a equação de Poisson (3.35),

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{r}} \rangle &= \int \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{r}} f_e(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^2r d^2v \\ &= \frac{1}{2\pi} \int \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{r}} \nabla^2 \psi_e^{2D} d^2r \\ &= - \int r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \nabla^2 \psi_e^{2D} dr \\ &= - \int r \frac{\partial \psi_e^{2D}}{\partial r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \psi_e^{2D}}{\partial r} \right) dr \\ &= - \frac{1}{2} \int_0^{r_e(t)} dr \frac{\partial}{\partial r} \left[\left(r \frac{\partial \psi_e^{2D}}{\partial r} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (3.59)$$

Como o gradiente do potencial em r_e é simplesmente $1/r_e$ obtemos que,

$$\langle \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{r}} \rangle = -1/2. \quad (3.60)$$

O nosso interesse é analisar o comportamento do sistema próximo à condição virial, é conveniente escrever a equação de envelope para o sistema em termos do número virial inicial \mathcal{R}_0 . Desta forma, fixamos o valor inicial da emitância $\varepsilon^2(0) = v_m^2 = \mathcal{R}_0^2$ e obtemos que,

$$\ddot{r}_e(t) = \frac{\mathcal{R}_0^2}{r_e^3(t)} - \frac{1}{r_e(t)}. \quad (3.61)$$

Se $\ddot{r}_e = 0$ o sistema não desenvolve oscilações. Por outro lado lembrando que $r_e(0) = 1$ em $t = 0$ obtemos que se $\ddot{r}_e = 0$ então $\mathcal{R}_0 = 1$ o que equivale de fato à condição virial para sistema.

Similarmente ao que fizemos no caso unidimensional comparamos a solução r_e com os dados obtidos da dinâmica molecular e percebemos um bom acordo com a simulação de N -corpos especialmente para tempos curtos (Fig. 3.11).

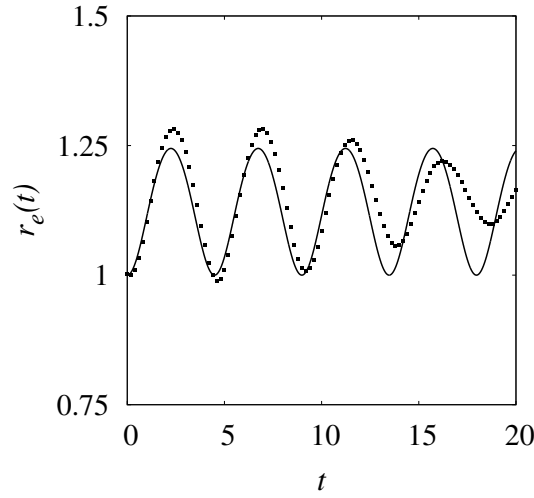


Figura 3.11 Evolução do envelope de acordo com a aproximação dada pela eq. 3.61 (linha contínua) e de acordo com a simulação de N -corpos (pontos) para $\mathcal{R}_0 = 1,05$. Percebe-se um bom acordo especialmente para tempos curtos.

3.3.2.3 Modelo de Partícula Teste

Seguindo o mesmo raciocínio dado no capítulo anterior, analisemos o comportamento de partículas teste sujeitas a um potencial oscilante ψ_e^{2D} que satisfaz à equação de Poisson (3.35) para a função de distribuição f_e do envelope do sistema, ou seja,

$$f_e(r, v, t) = \eta_e^{2D} \Theta(r_e(t) - r) \Theta(v_m - v) \quad (3.62)$$

com $\eta_e^{2D} = [\pi^2 r_e(t)^2 v_m^2]^{-1}$. Desse modo é fácil de ver que,

$$\psi_e^{2D}(r, t) = \begin{cases} \frac{r^2(t) - r_e^2(t)}{2r_e(t)^2} & \text{para } r(t) \leq r_e(t) \\ \ln[r(t)] & \text{para } r(t) \geq r_e(t) \end{cases} \quad (3.63)$$

o que significa que uma partícula teste localizada na posição r_i^0 com momento angular $p_{\theta_i}^0$ evolui dinamicamente de acordo com,

$$\ddot{r}_i^0(t) - \frac{l_{\theta_i}^0{}^2}{r_i^0{}^3(t)} = \begin{cases} -\frac{r_i^0(t)}{r_e^2(t)} & \text{para } r_i^0(t) \leq r_e(t) \\ -\frac{1}{r_i^0(t)} & \text{para } r_i^0(t) \geq r_e(t) \end{cases} \quad (3.64)$$

com o vínculo de que $r_e(t)$ seja simultaneamente solução de (3.61).

Integramos as equações para 15 partículas teste, distribuídas uniformemente com $r_i^0 \in [0 : 1]$ e $v_i^0 \in [0 : v_m]$ com $v_m = \mathcal{R}_0$, usando a mesma metodologia empregada na dinâmica de N -corpos. Plotamos as saídas das posições e velocidades de todas as partículas quando $r_e(t)$ atinge seu valor mínimo (seções de Poincaré) de maneira similar ao caso em 1D, conforme Fig. 3.12.

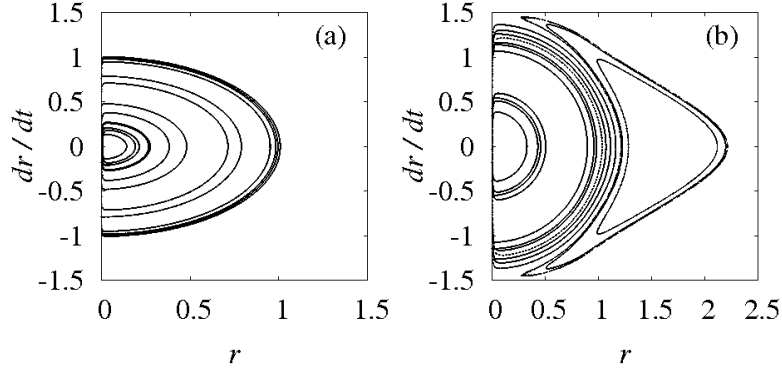


Figura 3.12 Seções de Poincaré para os casos em que $\mathcal{R}_0 \approx 1$ (a) e $\mathcal{R}_0 = 0,95$ (b). Verifica-se em (a) a formação de uma única ilha de ressonância enquanto que em (b) a formação de duas ilhas de ressonância.

Percebe-se claramente que nas simulações de N -corpos o espaço de fase é completamente preenchido na região do halo limitada pela máxima energia que um partícula pode receber pela dinâmica de partículas teste 3.3.2.3.

3.3.2.4 Distribuição Núcleo-Halo

Para avaliar o qSS, substituímos (2.32) na equação de Poisson (3.35) assumindo que a distribuição para o estado quasi estacionário seja também do tipo núcleo-halo (2.32) ou seja,

$$\nabla^2 \psi_{ch}^{2D}(r) = 4\pi^2 \begin{cases} \eta(\epsilon_F - \psi_{ch}^{2D}(r)) + \chi(\epsilon_h - \epsilon_F) & \text{para } \psi_{ch}^{2D}(r) < \epsilon_F, \\ \chi(\epsilon_h - \psi_{ch}^{2D}(r)) & \text{para } \epsilon_F \leq \psi_{ch}^{2D}(r) \leq \epsilon_h, \\ 0 & \text{para } \psi_{ch}^{2D}(r) > \epsilon_h. \end{cases} \quad (3.65)$$

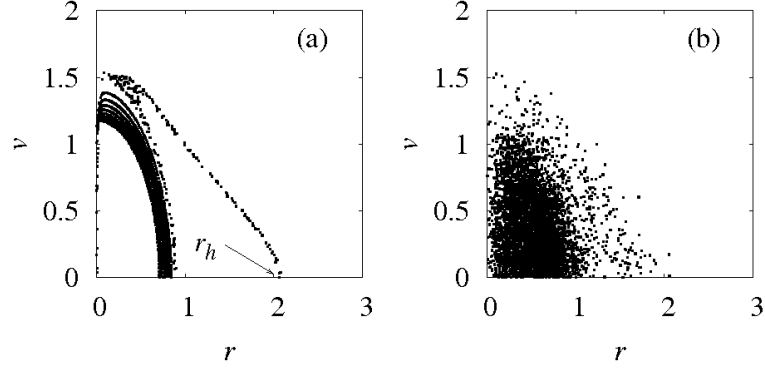


Figura 3.13 Seção de Poincaré para partículas teste em (a) e espaço de fase em $t=2000$ (b) para o sistema inicialmente com $\mathcal{R}_0 = 0,9$. Através da dinâmica das partículas teste determinamos a máxima energia ϵ_h que uma partícula no sistema pode atingir. Nesse caso em particular, $\epsilon_h = \ln(r_h)$ sendo r_h a máxima posição atingida pela partícula teste.

Como estamos no limite de campo médio, pela simetria azimutal do problema, podemos reescrever o potencial como

$$\psi_{ch}^{2D}(r) = \psi_{core}^{2D}(r)\Theta(r_c - r) + \psi_{halo}^{2D}(r)\Theta(r - r_c)\Theta(r_h - r) + \psi_{out}^{2D}(r)\Theta(r - r_h) \quad (3.66)$$

onde definimos ψ_{core}^{2D} para $\psi_{ch}^{2D} < \epsilon_F$, ψ_{halo} para $\epsilon_F \leq \psi_{ch}^{2D} \leq \epsilon_h$, e ψ_{out} para $\psi_{ch}^{2D} > \epsilon_h$. Mudando as variáveis para $r^* = 2\pi r\sqrt{\eta}$ e $r^{**} = 2\pi r\sqrt{\chi}$, podemos reescrever (3.65) como

$$\psi_{core}'' + \frac{\psi_{core}'}{r^*} + \psi_{core} = \epsilon_F + \frac{\chi}{\eta}(\epsilon_h - \epsilon_F), \quad (3.67)$$

$$\psi_{halo}'' + \frac{\psi_{halo}'}{r^{**}} + \psi_{halo} = \epsilon_h, \quad (3.68)$$

$$\psi_{out}'' + \frac{\psi_{out}'}{r} = 0. \quad (3.69)$$

A solução para as duas primeiras equações (3.67 e 3.68) pode ser escrita em termos das funções de Bessel de primeiro tipo e ordem zero [131],

$$\psi_{core}(r) = \epsilon_F + \frac{\chi}{\eta}(\epsilon_h - \epsilon_F) + C_1 J_0(r^*) + C_1' Y_0(r^*), \quad (3.70)$$

$$\psi_{halo}(r) = \epsilon_h + C_2 J_0(r^{**}) + C_3 Y_0(r^{**}), \quad (3.71)$$

A última (3.69) representa a equação de Laplace e tem solução simples dada por

$$\psi_{out}(r) = C_4 \ln r + C_4', \quad (3.72)$$

onde $\{C_i\}$ são constantes de integração.

Com a necessidade de regularidade da solução na origem juntamente com o fato de que no limite em que $r \rightarrow \infty$ o potencial deve obedecer à condição dada na Eq.(3.49)

encontramos que $C_{1'} = 0$, $C_{4'} = 0$ e $C_4 = 1$, respectivamente. O potencial então se reduz para

$$\psi_{core}(r) = \epsilon_h + C_1[(\eta/\chi - 1)J_0(r_c^*) + J_0(r^*)], \quad (3.73)$$

$$\psi_{halo}(r) = \epsilon_h + C_2 J_0(r^{**}) + C_3 Y_0(r^{**}), \quad (3.74)$$

$$\psi_{out}(r) = \ln(r), \quad (3.75)$$

onde definimos r_c de tal forma que $\epsilon_F = \psi(r_c)$.

As outras condições a serem satisfeitas pelo potencial são referentes à continuidade do potencial e da sua derivada,

$$\begin{cases} \psi_{core}(r_c) - \psi_{halo}(r_c) = 0, \\ \psi_{halo}(r_h) - \psi_{out}(r_h) = 0, \\ \psi'_{halo}(r_h) - \psi'_{out}(r_h) = 0. \end{cases}$$

Resolvendo estas equações encontramos as constantes $C_{1,2,3}$ como funções de (r_c, χ) e dos parâmetros (ϵ_h, η) ,

$$C_1 = \frac{\pi\chi (Y_0(2\pi r_c\sqrt{\chi}) J_0(2\pi r_h\sqrt{\chi}) - J_0(2\pi r_c\sqrt{\chi}) Y_0(2\pi r_h\sqrt{\chi}))}{2\eta J_0(2\pi r_c\sqrt{\eta})}, \quad (3.76)$$

$$C_2 = -\frac{\pi Y_0(2\pi r_h\sqrt{\chi})}{2}, \quad (3.77)$$

$$C_3 = \frac{\pi J_0(2\pi r_h\sqrt{\chi})}{2}, \quad (3.78)$$

As equações que restam são portanto a da continuidade de $\psi'_{ch}{}^{2D}(r)$ em r_c e da conservação da energia.

$$\begin{cases} \mathcal{E}(r_c, \chi) - \mathcal{E}_0 = 0, \\ \psi'_{core}(r_c) = \psi'_{halo}(r_c), \end{cases} \quad (3.79)$$

onde ' representa a derivada com relação a r e

$$\mathcal{E}(r_c, \chi) = \frac{\epsilon_h}{2} - \frac{\pi^4 \chi (\eta - \chi) J_2(r_c^*) r_c^2 [Y_0(r_c^{**}) J_0(r_h^{**}) - J_0(r_c^{**}) Y_0(r_h^{**})]^2}{4\eta J_0(r_c^*)}. \quad (3.80)$$

Com essas duas equações determinamos r_c e χ e portanto determinamos de maneira única a função de distribuição para os casos em que $\mathcal{R}_0 \neq 1$. Comparando os resultados teóricos com a simulação de dinâmica molecular (Fig. 3.14) encontramos um excelente acordo entre ambos.

3.3.3 Tempo de Relaxação

Por último, exploramos o tempo de vida $\tau_\times(N)$ de um estado estacionário com um número finito de partículas. Para isso definimos um parâmetro de cruzamento

$$\zeta(t) = \frac{1}{N^2} \int_0^\infty [N(r, t) - N_{ch}(r)]^2 dr \quad (3.81)$$

onde $N(r, t)$ é o número de partículas dentro de cascas localizadas entre r e $r + dr$ em cada instante da simulação t e $N_{ch}(r) = 2\pi Nr \int f_{ch}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d^2\mathbf{v}$ onde $f_{ch}(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ é a distribuição estacionária do tipo núcleo-halo (2.32). Na Fig. 3.15a plotamos o valor de $\zeta(t)$ para o sistema com diferentes números de partículas. Na Fig. 3.15b mostramos que se escalamos o tempo com $\tau_\times = N^\gamma \tau_D^{2D}$, onde $\gamma = 1,35$, todas as curvas caem sobre uma curva universal evidenciando a divergência do tempo de cruzamento no limite termodinâmico.

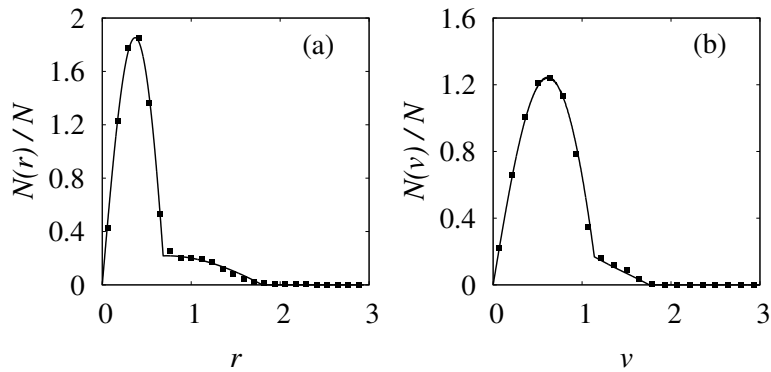


Figura 3.14 Distribuição em posição (a) e velocidade (b) para um sistema com $\mathcal{R}_0 = 0,75$. A linha cheia corresponde à predição teórica obtida usando a função de distribuição núcleo-halo (2.32), e os pontos são resultados da dinâmica molecular com $N = 10000$ partículas.

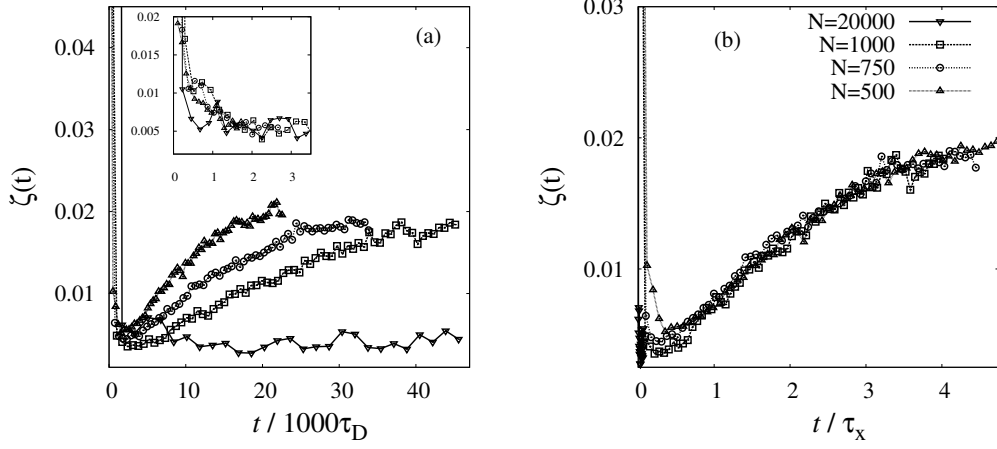


Figura 3.15 (a) $\zeta(t)$ para diferentes número de partículas no sistema. Na região com zoom (a) mostramos o sistema indo para o estado tipo núcleo-halo após um tempo $t \approx 2000\tau_D^{2D}$. Quando o tempo é escalado por τ_x todos os dados em (a) caem sobre uma curva universal (b).

3.4 Revisitando o Problema em 3D

Apesar de que nunca o sistema em 3D relaxa para o equilíbrio (MB), o sistema também fica aprisionado em estados quasi-estacionários, conforme evidenciado em [117]. Desta forma, tendo em vista os resultados para os sistemas em uma e duas dimensões, retornamos ao problema tridimensional. Entendemos que se os mecanismos de relaxação são os mesmos podemos construir uma equação de envelope para o sistema.

Definimos como raio de envelope $r_{e3D} = \sqrt{\frac{5\langle r^2 \rangle}{3}}$ de modo que derivando duas vezes no tempo encontramos,

$$\ddot{r}_{e3D} + \frac{1}{r_{e3D}^2} - \frac{\mathcal{R}(t)}{r_{e3D}^3} = 0, \quad (3.82)$$

sendo,

$$\mathcal{R}(t) = -\frac{2K(t)}{V(t)}. \quad (3.83)$$

onde $K(t)$ representa a energia cinética e $V(t)$ a energia potencial.

Consideremos a dinâmica de 10 partículas teste distribuídas inicialmente de maneira uniforme nas posições $r_{i3D} \in [0 : r_m]$ com velocidades $v_{i3D} \in [0 : v_m]$

$$\ddot{r}_{i3D}(t) - \frac{l_{\theta_{i3D}}^2}{r_{i3D}^3(t)} = \begin{cases} -\frac{r_{i3D}(t)}{r_{e3D}^3(t)} & \text{para } r_{i3D}(t) \leq r_{e3D}(t) \\ -\frac{1}{r_{i3D}^2(t)} & \text{para } r_{i3D}(t) \geq r_{e3D}(t), \end{cases} \quad (3.84)$$

onde $r_{e3D}(t)$ evolui de acordo com (3.82), assumindo-se que $\mathcal{R}(t) \approx \mathcal{R}(0)$. Analisando

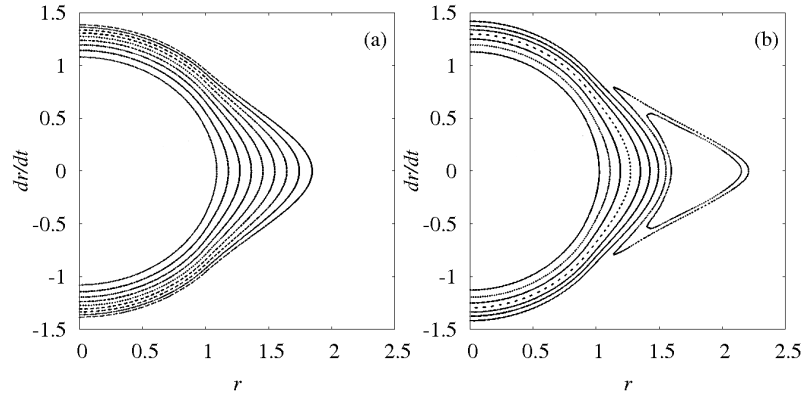


Figura 3.16 Seções de Poincaré para os casos em que $\mathcal{R}_0 \approx 1$ (a) e $\mathcal{R}_0 = 0,97$ (b) para o caso tridimensional. Verifica-se em (a) a formação de uma única ilha de ressonância enquanto que em (b) a formação de duas ilhas de ressonância.

as seções de Poincaré para o sistema quando $\mathcal{R}_0 = 0,97$, verificamos a formação de uma segunda ilha de ressonância, o que significa que o mecanismo de formação do halo associado com as ressonâncias na interação onda partícula, é igualmente aplicável no caso 3D. Dessa maneira, a menos das partículas que escapam para o infinito, a distribuição para o qSS deve igualmente ser do tipo (2.32).

3.5 Conclusões

Analisamos o processo de relaxação para o estado quasi-estacionário e para o equilíbrio em um sistema auto gravitante no limite de campo médio. A teoria baseada na distribuição tipo núcleo-halo mostrou-se em todos os casos analisados coerente com os resultados da simulação de N-corpos. Se o sistema obedece inicialmente à condição virial então o estado final corresponde razoavelmente bem à teoria baseada na relaxação violenta. O tempo de passagem para o equilíbrio foi determinado numericamente para o sistema em 2D, onde mostrou-se um coeficiente $\gamma = 1,35$. Quando no equilíbrio o sistema em 2D apresenta um comportamento peculiar no que diz respeito ao contato com reservatório térmico. O sistema em 2D mostra que só é estável para uma temperatura do reservatório $T_R = 0,5$. Em qualquer outra situação o sistema encontra-se fora do equilíbrio e colapsa ou se expande indefinidamente.

As principais publicações relativas a este capítulo da tese [139, 140] encontram-se anexadas no final da tese.

Plasmas Não-Neutros

Neste capítulo analisaremos o processo de relaxação em um plasma não-neutro. O termo “não-neutro” é exatamente para chamar a atenção para o fato de que trata-se de plasmas de uma componente. Essa condição é fundamental porque no caso de um sistema neutro os efeitos de blindagem no potencial podem tornar as interações entre as partículas no sistema efetivamente de curto-alcance, como é o caso do potencial de Yukawa [141, 142, 21].

Em detalhes, trataremos de um feixe intenso de partículas carregadas como mesma carga elétrica focalizadas por um campo magnético externo. A compreensão da física envolvida no transporte desses tipos de feixes de partículas carregadas é de importância fundamental no desenvolvimento de uma nova geração de aceleradores de partículas e geradores de onda eletromagnética passíveis de serem utilizados em aplicações como, por exemplo, fusão de íons pesados, física de altas energias, em comunicação, processamento de materiais, e tratamentos oncológicos.

Um ponto de extrema importância nesses procedimentos está ligado ao fato de lançar inicialmente um feixe com uma distribuição que já corresponda a um estado de equilíbrio exato. Contudo, as forças de carga espacial tornam virtualmente impossível esse equilíbrio. Outrossim à medida que as partículas são transportadas, o feixe naturalmente tenderá a relaxar para um estado estacionário [143, 144]. Ao longo desse processo, efeitos como formação de halo e crescimento de emitância são passíveis de ocorrer. Tais efeitos são prejudiciais porque limitam a eficiência do feixe e podem ser responsáveis pela perda de partículas no sistema; o que pode resultar em danos na parede de um acelerador. Portanto, modelar de primeiros princípios o crescimento de emitância e formação de halo transforma-se em um problema de grande relevância experimental. É claro que, para estimar tais grandezas é fundamental que se tenha, além de um bom conhecimento dos mecanismos que conduzem o feixe ao processo de relaxação, o conhecimento do estado estacionário atingido pelo feixe.

Em geral, vários efeitos são importantes na dinâmica desses sistemas, como o defasamento no envelope (raio rms do feixe) [145, 146, 147, 148, 149], movimentos fora do eixo de simetria [150, 151, 152, 153], não uniformidades na distribuição do feixe [154, 155, 156, 133], e força devido ao condutor em redor [157, 158, 159]. Entre todos esses efeitos, o que tem atraído uma maior de atenção é o defasamento no envelope que acredita-se ser a principal causa de crescimento e formação de halo. Conforme mostraremos no decurso do capítulo este defasamento vai estar intimamente relacionado com as condições iniciais longe da condição virial do sistema, similar ao que ocorria para os sistemas auto-gravitantes.

4.1 Modelo

Detalhadamente, o feixe consiste em partículas carregadas interagentes, confinadas por um campo magnético externo $\mathbf{B}^{ext}(\mathbf{r}) = B_0 \hat{z}$, propagando-se ao longo de uma direção axial \hat{z} com velocidade de módulo constante V_b . O feixe tem um raio característico r_b , e é envolvido por uma parede cilíndrica condutora de raio r_w ¹.

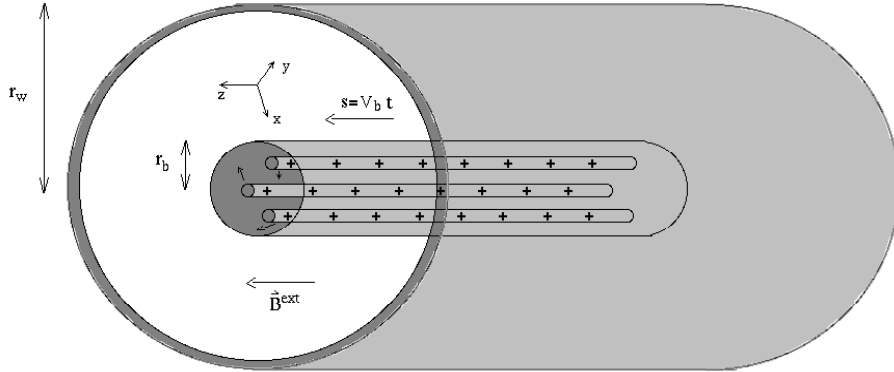


Figura 4.1 Feixe de partículas carregadas com raio característico r_b propagando-se ao longo da direção longitudinal \hat{z} com velocidade constante V_b . As partículas são confinadas por um campo magnético $\mathbf{B}^{ext} = B_0 \hat{z}$ sendo o feixe isolado do meio externo através de uma parede cilíndrica condutora localizada em r_w .

Supomos que o feixe tem simetria axial e o movimento ao longo da direção \hat{z} é uniforme. Por isso consideramos que a dinâmica relevante acontece somente no plano transversal “ \perp ”². Conseqüentemente, a variável temporal t pode ser substituída pela variável de posição longitudinal, s , por meio de uma transformação canônica no hamiltoniano original do sistema, onde $s = V_b t$ e $V_b = \beta_b c$ sendo c a velocidade da luz no vácuo, conforme ilustrado na Fig. 4.1.

A carga de uma partícula do feixe é dada por $Z_i e$ sendo Z_i o número atômico da partícula e e a carga do elétron. Supomos ainda que a velocidade transversal das partículas do feixe é muito menor que a velocidade na direção longitudinal e que por isso, a dinâmica ao longo do plano transversal pode ser considerada não relativística. Esse conjunto de aproximações restringe o modelo ao tratamento de feixe de partículas carregadas “finos e intensos”³, que é exatamente o que procuramos tratar neste capítulo [21].

Os campos elétrico \mathbf{E}^s e magnético \mathbf{B}^s de interação entre as partículas são determinados utilizando-se as equações de Maxwell [21]. O potencial elétrico é obtido da equação

¹ O fato da parede ser condutora implica em uma condição de contorno para o potencial elétrico de interação entre as partículas do feixe $\phi^s(r_w) = 0$.

² A aproximação $\nabla^2 \approx \nabla_{\perp}^2$ é consistente pois no feixe a variação do potencial ao longo da direção longitudinal é desprezível frente às variações sobre o plano transversal, portanto ao longo desse capítulo sempre que nos referirmos a ∇ estamos representando na realidade ∇_{\perp} .

³ Estas condições correspondem a aproximação paraxial do feixe.

de Poisson

$$\nabla_{\perp}^2 \phi^s = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) \phi^s(r, s) = -4\pi Z_i e n_b \quad (4.1)$$

com condições de contorno $\phi(r_w) = 0$ e $\phi'(0) = 0$, sendo n_b a densidade de número de partículas do sistema. O potencial vetor é determinado supondo-se que a corrente devido ao movimento das cargas no feixe é $Z_i e n_b V_{zb}$, sendo que a velocidade longitudinal média do feixe, $V_{zb}(r, s)$, pode ser aproximada por V_b :

$$\nabla_{\perp}^2 A_z^s(r, s) = -4\pi Z_i e n_b \beta_b. \quad (4.2)$$

Comparando as Eqs. (4.1) e (4.2), percebemos que os potenciais elétricos e magnéticos estão relacionados por

$$A_z^s = \beta_b \phi^s. \quad (4.3)$$

Dessa forma, resolvendo-se unicamente a Eq. de Poisson (4.1) os campos que atuam sobre uma dada partícula são completamente determinados,

$$\mathbf{E}^s = -\nabla \phi^s(r, s), \quad (4.4)$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}^{ext} + \beta_b \nabla \phi^s(r, s) \times \hat{z}. \quad (4.5)$$

Por uma questão de conveniência [21, 143], estudaremos o sistema no referencial de Larmor que gira com relação ao referencial do laboratório com uma velocidade angular constante $\Omega_L = -Z_i e B_0 / 2\gamma_b m \beta_b c^2$ onde $\beta_b = V_b/c$, $\gamma_b = (1 - \beta_b^2)^{-1/2}$ e m a massa de uma partícula, vide Fig. 4.2.

Convenientemente o potencial no feixe é também redefinido para

$$\psi^b(r, s) = (Z_i e / \gamma_b^3 m \beta_b^2 c^2) \phi^s(r, s), \quad (4.6)$$

que passa a ser uma grandeza adimensional. Nesse referencial, a focalização devido ao campo magnético, \mathbf{B}^{ext} , tem somente componente radial.

A mudança para o referencial de Larmor é feita através de uma mudança nas coordenadas $(r, \theta) \rightarrow (r', \theta')$ com

$$\begin{aligned} r' &= r, \\ \theta' &= \theta - \Omega_L s, \end{aligned} \quad (4.7)$$

conforme representado na Fig. 4.2.

Com isso, a evolução da função de distribuição $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, s)$ do sistema é dada pelas equações de Vlasov e Poisson [21].

$$\frac{\partial f}{\partial s} + \mathbf{v} \cdot \nabla f + [-\kappa_z^2 \mathbf{r} - \nabla \psi^b(r)] \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = 0, \quad (4.8)$$

$$\nabla^2 \psi^b(r) = -2\pi K \int f d\mathbf{v}, \quad (4.9)$$

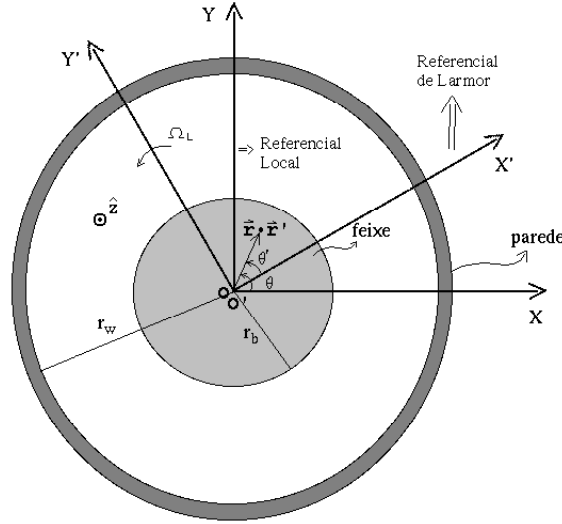


Figura 4.2 Mudança de referenciais: “O” representa o referencial do laboratório enquanto “O'” o referencial de Larmor.

sendo $n(\mathbf{r}, s) = \int f d\mathbf{v}$ o perfil de densidade do feixe, $\kappa_z = Z_i e B_0 / 2\gamma_b \beta_b m c^2 = |\Omega_L|$ é o avanço de fase de vácuo por unidade de comprimento axial, que determina a força do campo de focalização, $K = 2Z_i^2 e^2 N_b / \gamma_b^3 \beta_b^2 m c^2$ é conhecido como perveância (perveance) e representa basicamente uma medida da intensidade do feixe. O número de partículas por unidade de comprimento axial N_b é constante, \mathbf{r} é o vetor posição no plano transversal, e $\mathbf{v} \equiv d\mathbf{r}/ds$.

Tendo em vista a simetria axial do campo focalizador externo, assumimos que a distribuição do feixe não tem dependência angular θ , de modo que $f = f(r, v_r; v_\theta; s)$, onde a velocidade angular v_θ é uma constante de movimento para as partículas de feixe.

Como um dos comportamentos que gostaríamos de analisar ao fim do capítulo é exatamente o crescimento de emitância de um feixe de partículas carregadas, tornaremos adimensionais as distâncias e velocidades dividindo-as por $\sqrt{\varepsilon_0/\kappa_z}$ e $\sqrt{\varepsilon_0\kappa_z}$ respectivamente. Isto significa que doravante as distâncias e velocidades serão grandezas adimensionais e a perveância do feixe bem como a energia do sistema serão reescaladas por κ_z e $K^* = K/\varepsilon_0\kappa_z$ respectivamente ⁴.

A função de Green para a equação de Poisson em duas dimensões (4.9) é dada simplesmente por,

$$G^b(r) = -\ln r/r_w \quad (4.10)$$

onde r_w é o raio da parede condutora ao redor do feixe. O sistema é representado por N_b linhas ao longo do eixo z com massa unitária e densidade de carga efetiva $q = \sqrt{\frac{K^*}{N_b}}$. O

⁴Assumiremos que $m = 1$ e por conta disto doravante utilizaremos v_i para representar o momento p_i .

hamiltoniano é dado simplesmente por,

$$\mathcal{H}^b(r_i, \theta_i, p_{r_i}, p_{\theta_i}) = \sum_{i=1}^{N_b} \frac{p_{r_i}^2}{2} + \frac{p_{\theta_i}^2}{2r_i^2} - \frac{q^2}{2} \sum_{j=1}^{N_b} \ln \frac{|r_i - r_j|}{r_w} + \frac{r_i^2}{2} \quad (4.11)$$

onde q inclui os efeitos dos campos elétricos \mathbf{E}^s e magnéticos \mathbf{B}^s e o último termo representa a interação com o campo magnético externo.

A aceleração que uma partícula i no sistema sente devido à interação com as outras $N - 1$ partículas é dada simplesmente por,

$$\ddot{r}_i = \frac{p_{\theta_i}^2}{r_i^3} + \frac{K^*}{N_b} \sum_{j=1}^{N_b} \frac{1}{|r_i - r_j|} - r_i. \quad (4.12)$$

Utilizando o mesmo argumento apresentado para o sistema auto-gravitante em duas dimensões, realizamos na prática a simulação de cascas cilíndricas de massa unitária com densidade de carga q . Dessa maneira uma casca localizada na posição r_i interage com todas as outras n_{eff} cascas com raio $r < r_i$,

$$\ddot{r}_{eff}(r_i) = \frac{p_{\theta_i}^2}{r_i^3} + \frac{K^* n_{eff}(r_i)}{N_b r_i} - r_i, \quad (4.13)$$

$$n_{eff}(r_i) = \sum_{j=1}^{N_b} \Theta(r_i - r_j). \quad (4.14)$$

Desta forma o hamiltoniano efetivo utilizado na simulação equivale a

$$\mathcal{H}_{eff}^b(r_i, \theta_i, p_{r_i}, p_{\theta_i}) = \sum_{i=1}^{N_b} \frac{p_{r_i}^2}{2} + \frac{p_{\theta_i}^2}{2r_i^2} - \frac{K^*}{N_b} n_{eff}(r_i) \ln\left(\frac{r_i}{r_w}\right) + \frac{r_i^2}{2} \quad (4.15)$$

4.2 Equação de Envelope

De maneira similar ao caso da gravitação em duas dimensões, definimos como envelope do feixe a grandeza $r_b \equiv [2\langle r^2 \rangle]^{1/2}$ que derivando duas vezes com relação a s nos conduz à equação de envelope do feixe

$$\ddot{r}_b + r_b - \frac{K^*}{r_b} - \frac{(\varepsilon(t)/\varepsilon_0)^2}{r_b^3} = 0, \quad (4.16)$$

sendo $\varepsilon(t)$ a emitância do feixe 3.58 e $\varepsilon_0 = \varepsilon(0)$.

Como a derivação do teorema virial (apêndice C) é para sistemas não confinados, utilizaremos a equação de envelope para definir uma condição virial generalizada para o sistema, haja visto que nos casos anteriores sempre que $\ddot{r}_b = 0$ recaímos na condição

virial. Fazendo isso, encontramos o raio virial do sistema r_b^* , também conhecido como raio de feixe casado,

$$r_b^*(t) = \left\{ \frac{K^*}{2} + \left[\frac{K^{*2}}{4} + \left(\frac{\varepsilon(t)}{\varepsilon_0} \right)^2 \right]^{1/2} \right\}^{1/2}. \quad (4.17)$$

Isto significa que se o feixe inicialmente for lançado com um raio $r_b = r_b^*$ ele permanece sem desenvolver oscilações e por consequência, não desenvolve crescimento de emitância. Contudo é praticamente impossível lançar um feixe com raio inicial exatamente no equilíbrio. Dessa forma definimos um parâmetro que vai medir o quão distante um feixe encontra-se da condição virial,

$$\mu(t) \equiv r_b(t)/r_b^*(t), \quad (4.18)$$

esse parâmetro vai representar uma espécie de número virial generalizado para o feixe.

4.3 Condições Iniciais

Diferentemente dos sistemas auto-gravitantes em que somente o número virial era importante para a dinâmica, nesse caso temos dois parâmetros iniciais, o que é razoável haja visto que temos dois potenciais intrinsecamente distintos: um interno relacionado com a auto interação entre as partículas e outro externo relacionado com o campo focalizador. Podemos, portanto, inicialmente determinar (K, κ_z) ou (K^*, μ_0) , onde $\mu_0 = \mu(0)$. Adotaremos esse último pois estamos interessados em analisar principalmente o crescimento de emitância do feixe em termos do descasamento inicial, além, obviamente, da distribuição para o estado estacionário. Distribuimos inicialmente N_b partículas de maneira uniforme no espaço de fase nas posições $r_i \in [0, r_m]$ com velocidades $v_i \in [0, v_m]$,

$$f_0(r_m, v_m) = \eta \Theta(r_m - r) \Theta(v_m - v) \quad (4.19)$$

de modo a manter a área no espaço de fase inicial sempre constante (Fig. 4.3). Por isso, sem perda de generalidade adotaremos,

$$v_m = 1/r_m, \quad (4.20)$$

onde $r_m = r_b(0)$. Dessa maneira o potencial ψ_{wb}^b associado com a distribuição inicial (4.19) pode ser obtido resolvendo-se a equação de Poisson (4.9),

$$\frac{d^2 \psi_{wb}^b(r)}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\psi_{wb}^b(r)}{dr} = \begin{cases} -2K^*/r_m^2 & \text{para } r \leq r_m \\ -2K^*\pi\delta(r) & \text{para } r_m < r \leq r_w, \end{cases} \quad (4.21)$$

com contornos dados por $\psi_{wb}^b(r_w) = 0$ e $\psi_{wb}^b(0) = 0$. A solução é simples e dada por,

$$\psi_{wb}^b(r) = \begin{cases} -K^* \left[\frac{(r^2 - r_m^2)}{2r_m^2} + \ln(r_m/r_w) \right] & \text{para } r \leq r_m, \\ -K^* \ln(r/r_w) & \text{para } r_m \leq r \leq r_w, \end{cases} \quad (4.22)$$

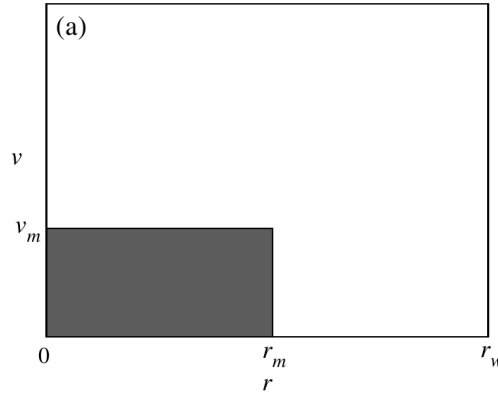


Figura 4.3 (a) Distribuição inicial no espaço de fase como normalização $\eta = \pi^{-2}$.

Em seguida, utilizando a definição da energia total em termos da função de distribuição (2.28) determinamos a energia inicial do sistema,

$$\mathcal{E}_0(K^*, r_w; \mu_0) = \frac{v_m^2}{4} + \frac{r_m^2}{4} + \frac{K^*}{8} - \frac{K^*}{2} \ln\left(\frac{r_m}{r_w}\right), \quad (4.23)$$

sendo r_m e v_m definidos pelas Eqs.(4.20) e (4.18) respectivamente ⁵.

4.4 Equilíbrio Termodinâmico: N_b Finito

Se o sistema tem um número finito de partículas, após um tempo suficientemente grande $\tau_x(N)$, ele deve relaxar para o equilíbrio termodinâmico descrito pela distribuição de Maxwell-Boltzmann (2.7) onde,

$$n(\mathbf{r}) = e^{-\beta[\omega(\mathbf{r}) + \frac{r^2}{2}]} \quad (4.24)$$

e $\omega(\mathbf{r})$ é o potencial de força média [129]. As correlações entre as partículas devem desaparecer à medida que o número de partículas N_b aumenta, o que significa que poderemos aproximar $\omega(\mathbf{r}) \approx \psi^p(r)$.

Nestas condições, resolver o problema significa encontrar de maneira auto consistente o potencial ψ_{eq}^b solução da equação de Poisson-Boltzmann,

$$\frac{d^2\psi_{eq}^b(r)}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\psi_{eq}^b(r)}{dr} = -\frac{4\pi^2 K^* C}{\beta} e^{-\beta[\psi_{eq}^b(r) + \frac{r^2}{2}]} \quad (4.25)$$

com contornos dados por $\psi_{eq}^b(r_w) = 0$ e $\psi'_{eq}(0) = 0$ sendo C uma constante de normalização e $\beta = 1/T$ o multiplicador de Lagrange associado à conservação da energia total. Por

⁵Se a distribuição inicial não for uniforme a dependência funcional entre v_m e r_m muda, haja visto que a condição inicial é a de que $\varepsilon_0 = 1$.

conta do campo externo a solução para a equação de Poisson (4.25) só pode ser obtida através de integração numérica (apêndice B) juntamente com as equações de conservação do número de partículas e energia total (2.28).

Para comparar a solução obtida com os resultados da simulação definimos o número de partícula entre $[r, r + dr]$ como,

$$N(r) = 2\pi N_b r \int d^2\mathbf{v} f_{MB}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \quad (4.26)$$

e o número de partículas com velocidades entre $[v, v + dv]$,

$$N(v) = 2\pi N_b v \int d^2\mathbf{r} f_{MB}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \quad (4.27)$$

que também são computados numericamente (Fig. 4.4).

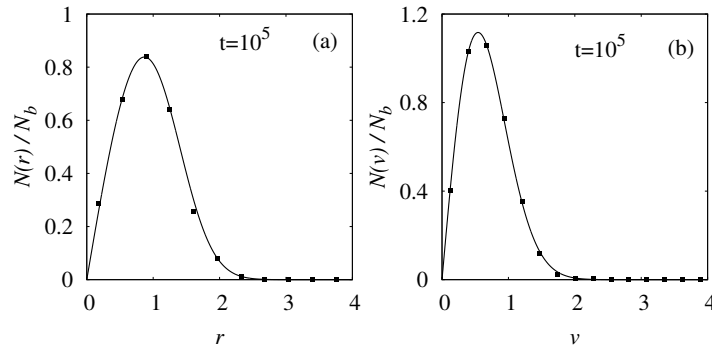


Figura 4.4 Distribuição em posição (a) e velocidade (b) para um sistema com $\mathcal{E}_0 = 1,597$. A linha cheia corresponde à predição teórica obtida usando a função de distribuição (MB) na equação de Poisson (4.25) e os pontos são resultado da simulação para $N = 1000$ partículas evoluindo no tempo segundo o hamiltoniano (4.11). Utilizamos nesse caso um integrador simplético de quarta ordem com passo de tempo constante de 10^{-2} [160].

4.5 Limite Termodinâmico: N_b Infinito

Consideremos agora o sistema no limite termodinâmico e analisemos a situação onde o sistema é inicialmente distribuído de acordo com a condição virial generalizada (4.17), ou seja, $\mu_0 = 1$.

4.5.1 Relaxação Violenta

Quando o sistema está inicialmente na condição virial esperamos que a distribuição do estado estacionário seja bem descrita pela teoria da relaxação violenta. Nessas condições,

a solução completa para o problema deve ser dada pela solução da equação de Poisson (4.9) com a função de distribuição (2.31), ou seja

$$\frac{d^2\psi_{lb}^b(r)}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\psi_{lb}^b(r)}{dr} = -\frac{4K^*}{\beta} \ln \left[1 + e^{-\beta[\psi_{lb}^b(r) + \frac{r^2}{2} - \alpha]} \right] \quad (4.28)$$

sendo α e β os multiplicadores de Lagrange obtidos das equações de conservação (2.28). A solução para esta equação pode ser obtida numericamente (apêndice B).

Definimos o número de partículas entre $[r, r + dr]$

$$N(r) = 2\pi N_b r \int d^2\mathbf{v} f_{lb}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \quad (4.29)$$

e número de partículas com velocidades entre $[v, v + dv]$,

$$N(v) = 2\pi N_b v \int d^2\mathbf{r} f_{lb}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \quad (4.30)$$

que também são computados numericamente (Fig. 4.5).

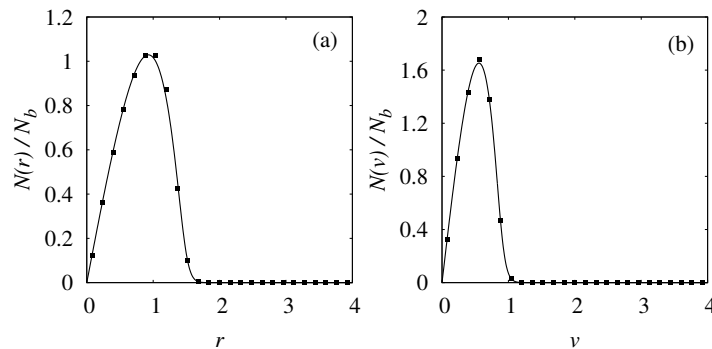


Figura 4.5 Densidade de número de partículas em posição (a) e velocidade (b) para um sistema na condição virial $\mu_0 = 1$ onde $K^* = 1$ e $r_w = 4$. A linha cheia corresponde à predição teórica obtida usando a função de distribuição oriunda da teoria da relaxação violenta (2.31) e os pontos são resultado da simulação para $N_b = 50000$ partículas evoluindo no tempo segundo o hamiltoniano (4.15). Utilizamos nesse caso o integrador tipo Runge-Kutta de quinta ordem com precisão fixa de modo a garantir um erro relativo na energia menor que 10^{-8} [161].

4.5.2 Modelo de Partícula Teste

Se o sistema encontra-se fora da condição virial ($\mu_0 \neq 1$) esperamos um comportamento oscilante no envelope do sistema (4.16). Essa oscilação deve implicar na existência de ondas de densidade no sistema. Para avaliar esse comportamento vamos analisar a dinâmica de uma partícula teste na presença de um potencial oscilante $\psi_e^p(r_b(t))$. Consideremos a

dinâmica de 15 partículas teste distribuídas inicialmente de maneira uniforme nas posições $r_i^p \in [0 : r_m]$ com velocidades $v_i^p \in [0 : v_m]$,

$$\ddot{r}_i^p(t) - \frac{P_{\theta_i}^p}{r_i^{p3}(t)} + r_i = \begin{cases} K^* \frac{r_i^p(t)}{r_b^2(t)} & \text{para } r_i^p(t) \leq r_b(t) \\ K^* \frac{1}{r_i^p(t)} & \text{para } r_i^p(t) \geq r_b(t) , \end{cases} \quad (4.31)$$

onde $r_b(t)$ evolui de acordo com (4.16), assumindo-se que $\varepsilon(t) \approx \varepsilon_0$ (Fig. 4.6).

Comparando o resultado da dinâmica das partículas teste com a dinâmica de N -corpos determinamos a máxima posição r_h atingida por uma partícula no sistema. Experimentalmente, em feixes com grande distribuição de carga espacial a máxima posição é bem aproximada pela relação $r_h = 2r_b^*(1 + \ln(\mu_0))$ [149].

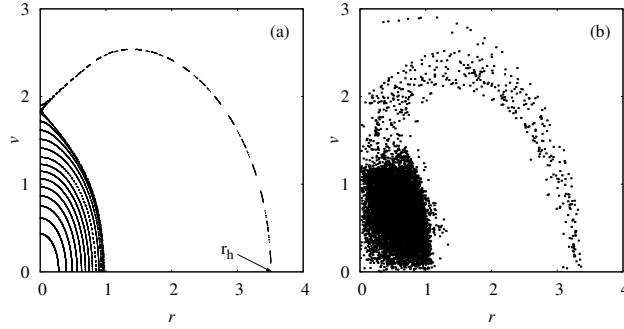


Figura 4.6 Seção de Poincaré para partículas teste (a) e (b) espaço de fase na simulação de N -corpos (4.15) em $t = 200$ para uma distribuição inicial com $\mu_0 = 1,5$ e $K^* = 1$. O método das partículas teste permite determinar a máxima posição atingida no espaço de fase por uma partícula na dinâmica completa de N -corpos, r_h , e por consequência o cálculo da máxima energia ϵ_h que uma partícula pode atingir. Nesse caso $\epsilon_h = \frac{r_h^2}{2} - \ln(\frac{r_h}{r_w})$.

4.5.3 Distribuição Núcleo-Halo

Propomos que para feixes descasados, ou seja, onde $\mu_0 \neq 1$, a função de distribuição para o qSS seja do tipo núcleo-halo (2.32) que por uma questão de simplicidade será reescrita da seguinte maneira,

$$f_p(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \frac{1}{\pi^2} [\Theta(\epsilon_F - \epsilon) + \chi \Theta(\epsilon_h - \epsilon) \Theta(\epsilon - \epsilon_F)] . \quad (4.32)$$

Adicionalmente dividimos o espaço em três regiões distintas, I , II , e III (Fig. 4.7), que correspondem respectivamente a $r < r_c$, $r_c < r < r_h$, e $r_h < r < r_w$, procedimento similar ao da Eq. (3.66). Definimos também,

$$n(r) = \int f_p(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d^2\mathbf{v} \quad (4.33)$$

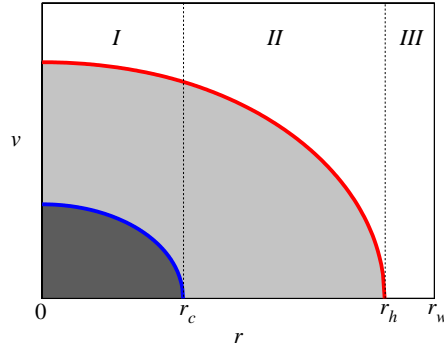


Figura 4.7 Regiões no espaço de fase utilizadas na resolução da Eq. (4.9).

de modo que nas três diferentes regiões teremos,

$$n_I(r) = \frac{2}{\pi} [\epsilon_F + \chi(\epsilon_h - \epsilon_F) - V_I(r)], \quad (4.34)$$

$$n_{II}(r) = \frac{2\chi}{\pi} [\epsilon_h - V_{II}(r)], \quad (4.35)$$

e $n_{III}(r) = 0$, onde $V_i(r) \equiv \psi_{chi}(r) + r^2/2$, $i = I, II, III$ é o potencial total que leva em conta tanto os efeitos da interação entre as partículas como a contribuição do campo externo. Os parâmetros r_c e r_h podem ser determinados pelas condições de que $V(r_c) = \epsilon_F$ e $V(r_h) = \epsilon_h$. Tanto $\psi_{chi}(r)$ como $V_i(r)$ e as respectivas primeiras derivadas devem ser contínuas em $r = r_c$ e $r = r_h$. Esses resultados juntamente com a equação de Poisson (4.9) fornecem um conjunto fechado de equações para o potencial nas diferentes regiões.

4.5.4 Conservação da Norma

Vamos simultaneamente resolver a equação de Poisson e já aplicar o vínculo de conservação da norma. Iniciaremos a solução pela região III que é livre de cargas e portanto o potencial deve ter solução do tipo $\psi_{chIII}(r) = D \ln r + E$. As constantes D e E podem ser facilmente determinadas pela imposição de que o potencial deve ser nulo em r_w , $\psi_{ch}(r_w) = 0$, e que por simetria o potencial na região III equivale ao potencial gerado por uma distribuição de cargas totalmente concentrada em $r = 0$,

$$\psi_{chIII}(r) = -K^* \ln(r/r_w). \quad (4.36)$$

Substituindo n_{II} , Eq. (4.35), e $\psi_{chII} = V_{II}(r) - r^2/2$ em (4.9) obtemos uma equação de Bessel inhomogênea e modificada para o potencial total na região II , cuja solução geral é

$$V_{II}(r) = BI_0(\alpha_h r) + CK_0(\alpha_h r) + \Delta, \quad (4.37)$$

onde I_m e K_m são as funções de Bessel modificadas de ordem m , $\alpha_h = 2(\chi K^*)^{1/2}$, e

$$\Delta = \frac{1}{2\alpha_h^2} (\alpha_h^2 r_h^2 - 4) + K^* \ln \left(\frac{r_w}{r_h} \right). \quad (4.38)$$

As constantes B e C podem ser determinadas pela continuidade do potencial total e da respectiva primeira derivada em $r = r_h$ levando para

$$B = \frac{2r_h}{\alpha_h} K_1(\alpha_h r_h) - (K^* - r_h^2) K_0(\alpha_h r_h), \quad (4.39)$$

$$C = \frac{2r_h}{\alpha_h} I_1(\alpha_h r_h) + (K^* - r_h^2) I_0(\alpha_h r_h). \quad (4.40)$$

Substituindo n_I , Eq. (4.34), e $\psi_{chI} = V_I(r) - r^2/2$ na Eq. (4.9) obtemos novamente uma equação inhomônea de Bessel modificada, cuja solução é,

$$V_I(r) = AI_0(\alpha_c r) + \frac{A}{\chi}(1 - \chi)I_0(\alpha_c r_c) + \Delta, \quad (4.41)$$

onde $\alpha_c = 2K^{*1/2}$, Δ é dado na Eq. (4.38), e como $V(r_c) = \epsilon_F$ podemos eliminar explicitamente ϵ_F da expressão. Impondo a continuidade da primeira derivada do potencial total em $r = r_c$, podemos expressar a constante A como

$$A = \chi^{1/2} \frac{BI_1(\alpha_h r_c) - CK_1(\alpha_h r_c)}{I_1(\alpha_c r_c)}. \quad (4.42)$$

A ultima condição a ser imposta é exatamente a de que o potencial seja contínuo em $r = r_c$, ou seja,

$$V_I(r_c) = V_{II}(r_c). \quad (4.43)$$

A equação (4.43) é transcendental e, juntamente com a equação para a conservação da energia que derivaremos em seguida, será utilizada na determinação dos parâmetros r_c e χ .

4.5.5 Conservação da Energia

Uma vez que já temos a equação cuja raiz garante a conservação da norma da distribuição inicial e como já temos o potencial que é solução do problema, consideremos a equação para a conservação da energia conforme descrito na Eq. (2.28). Para o feixe de partículas, podemos reescrevê-la como,

$$\mathcal{E} = \frac{\langle v^2 \rangle}{2} + \frac{\langle r^2 \rangle}{2} + \mathcal{E}_{\psi_{ch}}, \quad (4.44)$$

onde $\mathcal{E}_{\psi_{ch}}$ é a auto-energia do feixe por partícula,

$$\mathcal{E}_{\psi_{ch}} = \frac{1}{4\pi K^*} \int |\nabla \psi_{ch}|^2 d\mathbf{r} = \frac{1}{2K^*} \int_0^{r_w} \left(\frac{\partial \psi_{ch}}{\partial r} \right)^2 r dr. \quad (4.45)$$

As grandezas médias podem ser computadas em termos da função de distribuição estacionária. O primeiro termo está relacionado com a energia cinética e o segundo com o raio do envelope no estado estacionário ou seja, $r_{bs}^2 = 2\langle r^2 \rangle = 2 \int r^2 n(r) r dr$ onde o subíndice s representa a densidade no estado estacionário.

Utilizando as Eqs. (4.34), (4.35), (4.37), and (4.41), obtemos que

$$r_{bs}^2 = \left[2 + \frac{(8 - \alpha_h^2 r_h^2)}{\alpha_h^2 K^*} \right] r_h^2 - \frac{8Ar_c^2}{K^*} \left[\frac{(1 - \chi)I_0(\alpha_c r_c)}{2\chi} + \frac{I_1(\alpha_c r_c)}{\alpha_c r_c} \right] + \frac{8r_c [BI_1(\alpha_h r_c) - CK_1(\alpha_h r_c)] - 8r_h [BI_1(\alpha_h r_h) - CK_1(\alpha_h r_h)]}{\alpha_h K^*}. \quad (4.46)$$

O primeiro termo pode ser computado lembrando-se que a condição virial para o feixe Eq. (4.17), pode ser equivalentemente expressa por,

$$2\langle v^2 \rangle = r_{bs}^2 - K, \quad (4.47)$$

e se o sistema está em uma distribuição qualquer de equilíbrio deve satisfazer esta relação.

Já o último termo da Eq. (4.44) envolve a integral do campo elétrico ao quadrado e pode ser computada analiticamente em toda a região do espaço. Contudo o termo $\mathcal{E}_{\psi_{ch}}$, que representa a integral na região do halo, $r_c < r < r_h$, é demasiadamente extenso envolvendo uma combinação de funções especiais tipo, hipergeométricas, Bessel de várias ordens, Meiger, etc. [131].

Como a quantidade de partículas no halo é muito menor que a quantidade de partículas do núcleo vamos assumir que o termo $\mathcal{E}_{\psi_{ch}}$ possa ser desprezado no cálculo da energia total. Essa aproximação é justificada haja visto que do ponto de vista prático não é desejável que se tenha formação de halo e por isso experimentalmente os feixes são lançados de modo a não desenvolver muitas oscilações. Nesse sentido, é razoável dizer que o número percentual de partículas no halo é baixo se comparado com o número de partículas do núcleo.

Na prática isso indica que podemos considerar – para o cálculo da energia – que todas as partículas estão concentradas no núcleo $r \leq r_c$.

Consideremos então, que a região com $r_c < r < r_w$ é totalmente livre de cargas e que, portanto, o potencial nessa região é simplesmente $\psi_{ch} = -K^* \ln(r/r_w)$. Por fim a energia pode ser aproximada por ⁶,

$$\mathcal{E}_{\psi_{ch}} = \frac{r_c^2}{8K^*} \{ r_c^2 + 2A^2 \alpha_c^2 I_1^2(\alpha_c r_c) - 2A[4 + A\alpha_c^2 I_0(\alpha_c r_c)] I_2(\alpha_c r_c) \} - K^* \ln \left(\frac{r_c}{r_w} \right). \quad (4.48)$$

⁶Essa é uma aproximação que precisa ser analisada com cuidados em cada situação, nas situações em que $|\mu_0 - 1| \leq 0,5$ a teoria mostrou-se bem na descrição do estado estacionário. Contudo, nas situações em que o sistema estiver inicialmente muito distante da condição virial, o mais adequado é resolver as equações (2.28) numericamente conforme apêndice B ou considerar todos os termos na integral no cálculo analítico.

Nessas condições, obtemos a expressão final para a energia do feixe,

$$\frac{r_{bs}^2}{2} - \frac{K^*}{4} + \mathcal{E}_{\psi_{ch}} = \mathcal{E}_0, \quad (4.49)$$

onde r_{bs} , $\mathcal{E}_{\psi_{ch}}$, e \mathcal{E}_0 são dados, respectivamente, pelas Eqs. (4.46), (4.48), e (4.23). A equação (4.49) é também transcendental e precisa ser resolvida numericamente. Resolvendo essas equações para os parâmetros desconhecidos r_c e χ determina-se completamente o estado estacionário atingido pelo sistema.

4.6 Resultados

Comparamos os resultados previstos com a simulação completa de N -corpos. Além da distribuição inicial uniforme (4.19), consideramos uma distribuição inicial gaussiana,

$$f_{0g} = \frac{4}{\pi^2 r_m^2 v_m^2} e^{-2(v^2/v_m^2 + r^2/r_m^2)} \quad (4.50)$$

e outra semi-gaussiana,

$$f_{0sg} = \frac{2}{\pi^2 v_m^2 r_m^2} e^{-2v^2/v_m^2} \Theta(r_m - r) \quad (4.51)$$

onde r_m e v_m obedecem a Eq. (4.20), de modo que $\varepsilon_0 = 1$ (ver Fig. 4.8).

4.6.1 Crescimento de Emitância

Substituindo (4.47) em (3.58) é fácil ver que o crescimento de emitância no feixe é dado simplesmente por,

$$\varepsilon_s = r_{bs} \sqrt{r_{bs}^2 - K}, \quad (4.52)$$

onde r_{bs} é dado pela Eq. (4.46). Comparando o resultado previsto com a simulação de N -corpos encontramos um bom acordo entre a teoria e a simulação numérica e também com os resultados experimentais (Fig. 4.9, 4.10).

4.6.2 Partículas do Halo

Podemos contabilizar também o número de partículas que escapam para o halo do sistema. Essa quantidade corresponde à fração de partículas com energia entre ϵ_F e ϵ_h , ou seja $\mathcal{F}_h = (\chi/\pi^2) \int \Theta(\epsilon_h - \epsilon) \Theta(\epsilon - \epsilon_F) d^2 r d^2 v$ (Fig. 4.11). Fazendo a integral encontramos que,

$$\mathcal{F}_h = 1 - 2Ar_c^2 I_2(\alpha_c r_c). \quad (4.53)$$

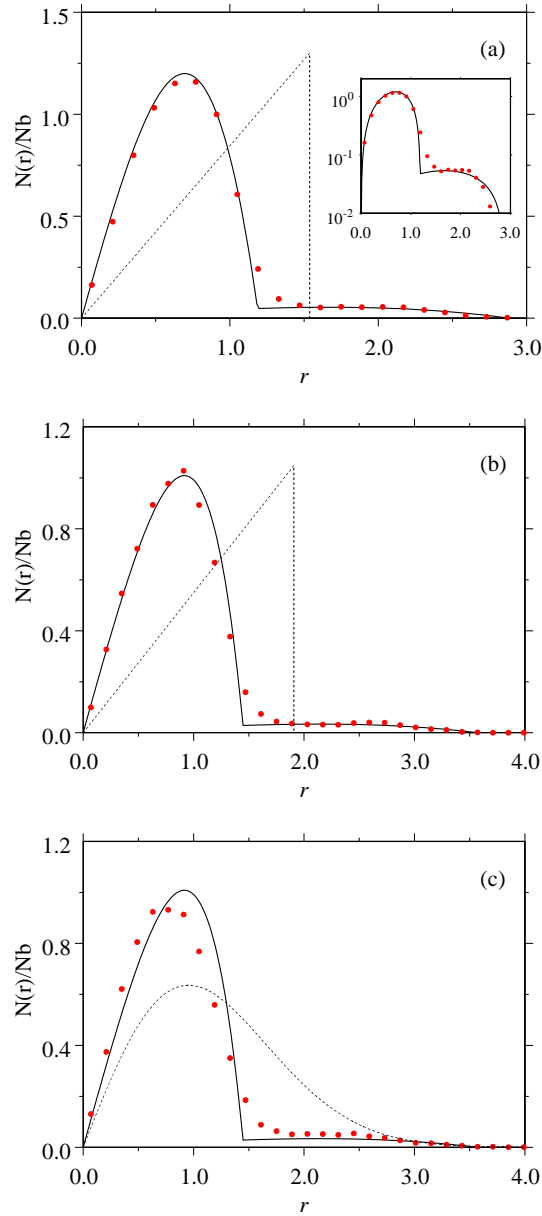


Figura 4.8 Distribuição em posição para um feixe inicialmente fora do equilíbrio com $\mu_0 = 1, 5$. Os pontos são resultados da simulação e as linhas pontilhadas representam a distribuição inicial. Em (a) temos uma distribuição inicial uniforme (4.19) com $K^* = 1$, em (b) uma distribuição inicial uniforme com $K^* = 0,1$ e, (c) uma distribuição inicial completamente gaussiana (4.50) com $K^* = 1$. As linhas cheias representam a previsão teórica para uma distribuição inicialmente uniforme. Percebe-se que no caso (c) a distribuição não é tão bem descrita pela teoria como nos dois casos anteriores. Isso advém do fato que a distribuição inicial tem mais de um nível e que, portanto, a distribuição final para o núcleo deve contemplar a preservação de todos os níveis de acordo com a dinâmica de Vlasov.

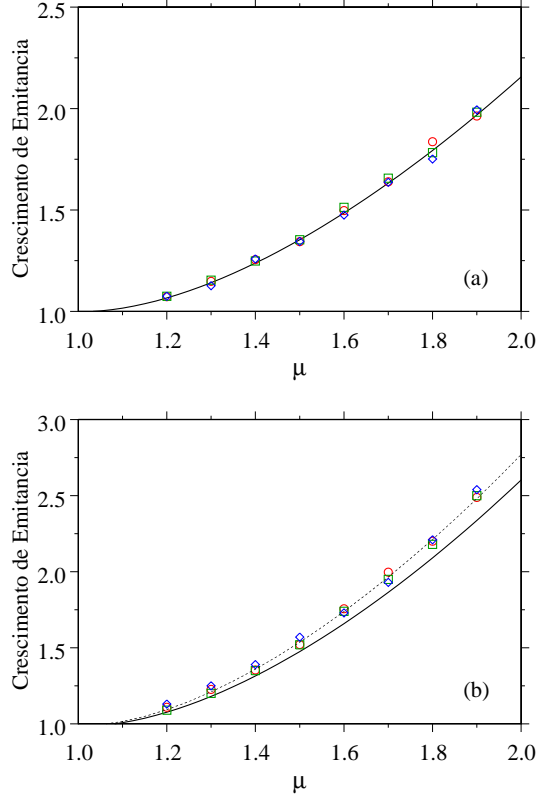


Figura 4.9 Crescimento na emitância do feixe, ε , em termos do número virial inicial μ_0 obtidos pela teoria (linha cheia) e por meio da simulação numérica (símbolos) para $K^* = 0,1$ em (a) e $K^* = 1$ em (b). Os símbolos correspondem a diferentes distribuições iniciais: uniforme (círculo), semi-gaussiano (quadrado) e, gaussiano (diamantes) enquanto que a linha pontilhada representa o resultado previsto pela Eq. (4.49). Se o cálculo da energia for feito exatamente (4.45) a predição teórica fica ainda melhor.

4.7 Tempo de Relaxação

Conforme fizemos no caso dos sistemas auto-gravitantes, consideramos aqui também a escala do tempo de relaxação para o equilíbrio. De fato o interesse nessa escala é mais teórico do que prático haja visto que a coordenada tempo é completamente mapeada na direção longitudinal z o que significa que longos tempos no laboratório representam experimentos com grandes extensões de propagação do feixe. Mesmo assim, definimos um parâmetro de cruzamento

$$\zeta(t) = \frac{1}{N^2} \int_0^\infty [N(r, t) - N_{ch}(r)]^2 dr \quad (4.54)$$

onde $N(r, t)$ é o número de partículas dentro de cascas localizadas entre r e $r+dr$ em cada instante da simulação t e $N_{ch}(r) = 2\pi Nr \int f_{ch}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d^2v$ onde $f_{ch}(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ é a distribuição estacionária dada pela Eq. (2.32). A escala de tempo dinâmico é definida como $\tau_D = \kappa_z$.

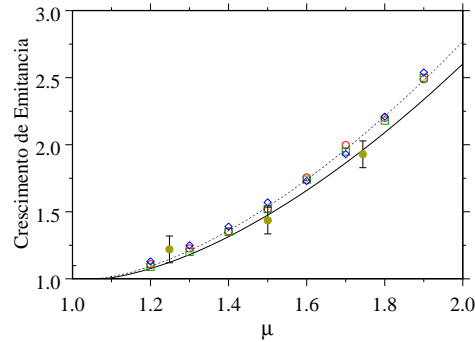


Figura 4.10 Crescimento na emitância do feixe ε em termos do número virial inicial μ_0 obtidos pela teoria (linhas cheia e pontilhada), por meio da simulação numérica (símbolos) para $K^* = 1$. Os símbolos correspondem a diferentes distribuições iniciais: uniforme (círculo), semi-gaussiano (quadrado) e, gaussiano (diamantes) enquanto que os pontos com barras de erro representam o resultado experimental obtido em [149].

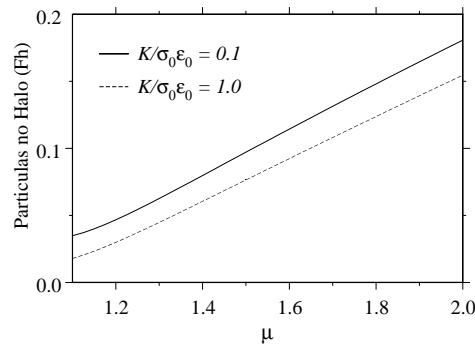


Figura 4.11 Fração de partículas no halo (4.53) como função do descasamento inicial (μ_0).

Se escalarmos o tempo τ_D com $\tau_x = N^\gamma \tau_D$, onde $\gamma = 1, 3$, todas as curvas caem sobre uma curva universal mostrando assim a divergência do tempo de cruzamento no limite termodinâmico (Fig. 4.12). O resultado é muito similar ao encontrado nos sistemas auto-gravitantes, sendo que recentemente um modelo teórico foi proposto para prever estas escalas onde mostra-se que a maior dependência do expoente está na dimensionalidade do sistema [136, 162].

4.8 Conclusões

Analizamos os feixes finos e intensos de partículas carregadas que inicialmente são lançados com um descasamento inicial. Mostramos que em geral quando o feixe está fora da

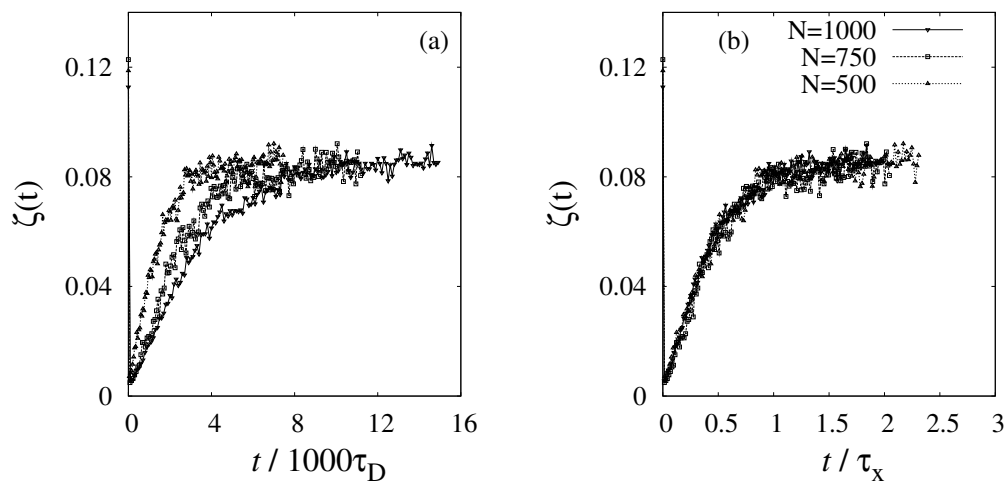


Figura 4.12 (a) $\zeta(t)$ para diferente número de partículas no sistema. Quando o tempo dinâmico é escalado com τ_x todos os pontos em (a) caem sobre uma curva universal (b).

condição virial $\mu_0 = 1$, a distribuição para o qSS apresenta uma separação de fases do tipo núcleo-halo que é bem descrita pela (2.32). Comparamos os resultados para o crescimento de emitância com resultados experimentais e verificamos um excelente acordo. As propriedades do equilíbrio não foram analisadas pois focamos especificamente no interesse experimental do modelo que implica em experimentos curtos sendo portanto, o maior interesse no estado estacionário.

As principais publicações relativas a este capítulo da tese [83, 110, 111] encontram-se anexadas no final da tese.

Revisitando o HMF

Até agora tratamos de sistemas com uma grande possibilidade de aplicação experimental e mostramos que a teoria estatística proposta mostra-se como uma boa aproximação para a descrição dos qSS em sistemas com interações de longo alcance. Ainda assim, um problema de grande interesse experimental e teórico está relacionado com a evidência das transições de fase, principalmente nesses casos que envolvem interações de longo alcance.

O objetivo principal nessa parte da tese é simplesmente mostrar que mesmo nos modelos que exibem transições de fase a distribuição final para o qSS também é do tipo núcleo-halo de modo que o *Ansatz* proposto para a solução da equação de Vlasov deve ser igualmente válido (2.32).

Nessa parte final vamos analisar, à luz da teoria utilizada, as transições de fase tanto de equilíbrio como de não-equilíbrio para modelos com interações de longo alcance. Para isso utilizaremos o modelo HMF (Hamiltonian Mean Field), que tem sido considerado como um modelo padrão para o estudo da dinâmica nos sistemas com interações de longo alcance. O HMF está diretamente relacionado como um modelo dinâmico para a interação de spins tipo o modelo de Heisenberg e portanto tem uma aplicabilidade que vai desde os sistemas clássicos (Plasmas e Gravitação) às interações magnéticas em sistemas quânticos (Modelo XY). O modelo dinâmico que utilizaremos consiste em N partículas com massa unitária restritas a mover-se sobre um círculo de raio unitário cuja dinâmica é governada pelo hamiltoniano ¹ [57].

$$H(\theta, p) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^N [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)], \quad (5.1)$$

onde o ângulo θ_i representa a posição da i -ésima partícula e p_i o respectivo momento conjugado [103, 163, 103]. O comportamento macroscópico do sistema é caracterizado pelo vetor magnetização $\mathbf{M} = (M_x, M_y)$, onde $M_x \equiv \langle \cos \theta \rangle$, $M_y \equiv \langle \sin \theta \rangle$, e $\langle \dots \rangle$ representa a média sobre a função de distribuição de uma partícula (microcanônico).

Desta forma, dinamicamente o sistema com N -partículas evolui de acordo com,

$$\ddot{\theta}_i = -M_x(t) \sin \theta_i(t) + M_y(t) \cos \theta_i(t). \quad (5.2)$$

onde sem perda de generalidade simularemos distribuições de partículas que mantenham a paridade, ou seja, se inicialmente $M_y = 0$ o sistema deve permanecer com essa

¹Rigorosamente a solução da eq. de Poisson para o sistema em uma dimensão e periódico tem como função de Green $G(\theta, \theta') = \frac{1}{2}|\theta - \theta'| - \frac{1}{4\pi}(\theta - \theta')^2$.

magnetização durante toda a dinâmica. Como o hamiltoniano não tem dependência temporal explícita em qualquer instante de tempo a energia por partícula no sistema é dada simplesmente por,

$$U = \frac{H}{N} = \frac{\langle p^2 \rangle}{2} + \frac{1 - M(t)^2}{2}, \quad (5.3)$$

que é uma quantidade conservada.

Como nesse caso não temos uma Eq. de Poisson para o sistema, resolver totalmente o problema do ponto de vista estatístico significa determinar a função de distribuição $\bar{f}(\theta, p)$ de modo que

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{f}(\theta, p) \cos \theta d\theta dp &= M_{0x} \\ \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{f}(\theta, p) u(\theta, p) d\theta dp &= U_0 \\ \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{f}(\theta, p) d\theta dp &= 1 \end{aligned} \quad (5.4)$$

onde $u(\theta, p) = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2}(1 - M_x \cos \theta)$.

Quando no modelo *XY* as interações envolvem somente os primeiros vizinhos (curto alcance) o estado final atingido pelo sistema corresponde ao estado de equilíbrio termodinâmico, em geral bem descrito pela ME de equilíbrio. Por outro lado quando as interações passam a ser de longo alcance a interação passa a ser do tipo campo médio e a solução mostra-se trivial na representação do ensemble canônico por exemplo [37].

Poderíamos contudo, visto o desenvolvimento dos dois capítulos anteriores, nos questionarmos como seria a descrição desse modelo no ensemble micro-canônico? seria equivalente à descrição do canônico? Obviamente não vamos utilizar a premissa de que o sistema se comporta de maneira ergódica e com isso efetuar um processo de contagem, determinar a entropia e por fim o estado de equilíbrio do sistema. Vamos inicialmente analisar dinamicamente a evolução do sistema, ou seja, saindo de um estado inicial que não corresponde ao equilíbrio termodinâmico em que escala de tempo o sistema atinge o equilíbrio? Esse procedimento é totalmente equivalente ao procedimento micro-canônico e do ponto de vista da ME de equilíbrio deveria apresentar os mesmos resultados do canônico.

Outrossim, resultados preliminares mostram que o expoente ligado ao tempo de cruzamento para o equilíbrio é $\gamma = 1$ se o sistema inicial é do tipo desmagnetizado e $\gamma = 1,7$ se o sistema inicialmente encontra-se em uma fase magnética [58, 164, 165], ou seja no limite termodinâmico o sistema deve permanecer nos qSS ao invés do equilíbrio.

Acredita-se que a distribuição para os estados estacionários é completamente determinada pela teoria da relaxação violenta. Por outro lado com o desenvolvimento da tese verificamos que a teoria da relaxação violenta só parece ser aplicável nas situações que envolvem condições iniciais bem particulares (condição virial). Esperamos portanto mostrar também para o HMF quando a aproximação da teoria da relaxação violenta deve funcionar.

5.1 Equilíbrio Termodinâmico: N Finito

Na situação em que o número N é finito o sistema deve atingir o equilíbrio em algum momento e as propriedades do equilíbrio podem ser determinadas utilizando-se a ME padrão. Como o HMF não apresenta alguns efeitos como inequivalência entre os ensembles [65, 2], vamos utilizar o ensemble canônico para determinar o estado de equilíbrio [37]. O estado de equilíbrio é totalmente definido pela magnetização M que deve obedecer à seguinte igualdade,

$$M_x = \frac{\int d\theta dp \cos \theta e^{-\beta H(\theta,p)}}{\int d\theta dp e^{-\beta H(\theta,p)}} \quad (5.5)$$

onde a função do equilíbrio é basicamente $f_{eq}(\theta, p) = e^{-\beta H(\theta,p)}$ sendo $\beta = 1/T$ o multiplicador de Lagrange associado com a temperatura do sistema.

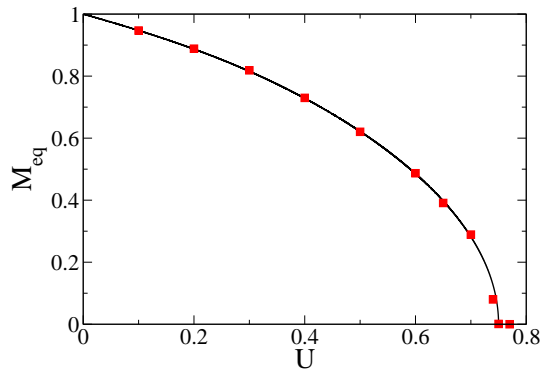


Figura 5.1 Magnetização para o estado de equilíbrio no HMF. Os pontos são resultados da simulação numérica de acordo com (5.2) para $N = 1000$ partículas. A linha cheia corresponde à predição teórica da equação (5.6).

Por fim resolver o problema se reduz basicamente em encontrar a solução para a seguinte equação transcendental,

$$M_x = \frac{I_1(\beta M_x)}{I_0(\beta M_x)} \quad (5.6)$$

onde I_m representa a função de Bessel modificada de ordem m . O problema pode ser resolvido graficamente ou simplesmente encontrando-se a raiz de $M_x - \frac{I_1(\beta M_x)}{I_0(\beta M_x)}$.

O sistema apresenta uma transição de segunda ordem em $\beta_c = 2$, ou seja, em uma temperatura crítica $T_c = 0,5$ o que corresponde a $U_c = 3/4$ [2] (Fig. 5.1).

5.2 Limite Termodinâmico: N Infinito

Já no limite termodinâmico, ou seja, quando $N \rightarrow \infty$ o tempo de relaxação diverge. Ainda assim o sistema continua exibindo uma transição tipo ordem-desordem que nesse caso, diferente da transição para o equilíbrio termodinâmico, vai depender da condição inicial do sistema que é totalmente determinada respectivamente pela energia e magnetização inicial (U, M_0).

5.3 Equação de Envelope

Entendemos que o ponto chave na solução do problema da relaxação é encontrar as condições nas quais o sistema é descrito pela teoria da relaxação violenta (2.31) e quando apresenta o perfil descrito pela distribuição (2.32). Para isso vamos tentar construir uma equação de envelope para o sistema definindo $\theta_e(t) = \sqrt{3\langle\theta^2\rangle}$, de modo que $\theta_e(0) = \theta_0$. Em seguida diferenciamos $\theta_e(t)$ duas vezes com respeito ao tempo e obtemos a equação de envelope,

$$\ddot{\theta}_e = \frac{3\langle p^2 \rangle}{\theta_e} + \frac{3\langle \theta \ddot{\theta} \rangle}{\theta_e} - \frac{9\langle \theta p \rangle^2}{\theta_e^3}. \quad (5.7)$$

onde usando a conservação da energia, $\langle p^2 \rangle = 2u + M_x^2(t) - 1$. Para calcular $\langle \theta \ddot{\theta} \rangle$, utilizamos a equação de movimento para θ e supomos que a distribuição dos ângulos permanece aproximadamente uniforme no intervalo $[-\theta_e, \theta_e]$, obtemos que,

$$\begin{aligned} \langle \theta \ddot{\theta} \rangle &= \frac{-M_x(t)}{2\theta_e} \int_{-\theta_e(t)}^{\theta_e(t)} \theta \sin \theta d\theta \\ &= M_x(t) \cos \theta_e(t) - M_x^2(t), \end{aligned} \quad (5.8)$$

onde a magnetização $M_x(t)$ é

$$\begin{aligned} M_x(t) &= \frac{1}{2\theta_e} \int_{-\theta_e(t)}^{\theta_e(t)} d\theta \cos \theta \\ &= \frac{\sin \theta_e(t)}{\theta_e(t)}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Se desprezarmos as correlações entre posições e velocidades, $\langle \theta p \rangle = 0$, obtemos uma equação dinâmica para a envelope do sistema

$$\ddot{\theta}_e = \frac{3}{\theta_e(t)} (2u + M_x(t) \cos \theta_e(t) - 1), \quad (5.10)$$

onde, $u = p_0^2/6 + (1 - M_0^2)/2$ e $M_0 = \sin(\theta_0)/\theta_0$.

De maneira similar ao caso da gravitação e aos plasmas onde a condição virial generalizada, por assim dizer, estava relacionada com a condição de envelope estacionário,

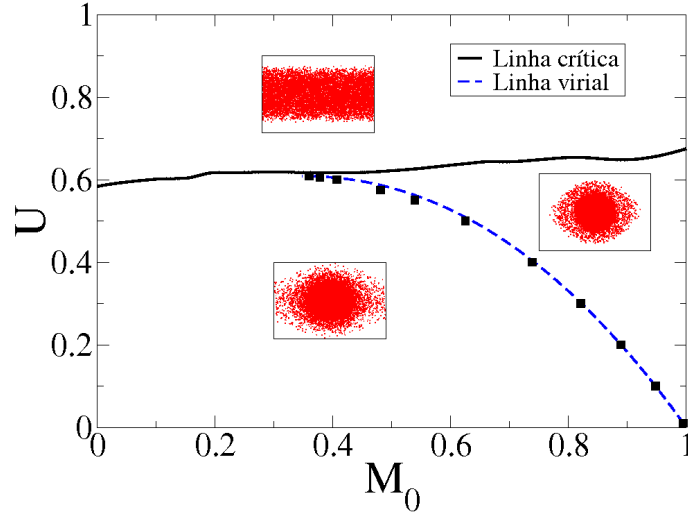


Figura 5.2 Diagrama de fases para o HMF obtido via simulações de dinâmica molecular. A linha cheia é a linha da transição de fase de primeira ordem separando as fases paramagnética e ferromagnética obtida via simulação de N -corpos de (5.2). A curva pontilhada é a condição virial generalizada (5.11) e os quadrados representam a magnetização no estado estacionário obtido pela (2.31) na solução das equações (5.4).

$\ddot{\theta}_e = 0$; esperamos que a teoria baseada na relaxação violenta só funcione ao longo da curva no plano (U, M_0) definida pela condição de envelope estacionário,

$$(2u - 1)\theta_0 + \sin \theta_0 \cos \theta_0 = 0. \quad (5.11)$$

De fato, ao longo da curva as oscilações do envelope deixam de existir, e o estado final é bem descrito pela teoria da relaxação violenta (Fig. 5.2). É válido salientar que a curva com a condição virial generalizada estende-se até o ponto onde $(U, M_0) \approx (0, 5947; 0, 34)$ que fica abaixo da linha crítica. Portanto se a teoria da relaxação violenta só funciona na condição em que o sistema encontra-se na condição virial, ou seja sobre a linha virial, a (2.31) não pode prever bem a linha crítica de transição como apontado na literatura (Fig. 5.3).

De fato a predição para a linha crítica via teoria da relaxação violenta mostrou-se incorreta principalmente por admitir a existência de um ponto tri-crítico em $M_0 \approx 0, 16$ [103]. Já se utilizarmos a teoria baseada na função de distribuição tipo núcleo-halo (2.32) obtemos uma transição claramente de primeira ordem no ponto onde $M_0 = 0.4$ (Fig. 5.4) que estende-se pelo menos até o ponto onde $M_0 = 0, 6$ [166].

5.4 Conclusões

Neste capítulo mostramos de forma breve que também em um modelo que exhibe transições de fase quando no limite termodinâmico o sistema mantém-se aprisionado nos qSS. De

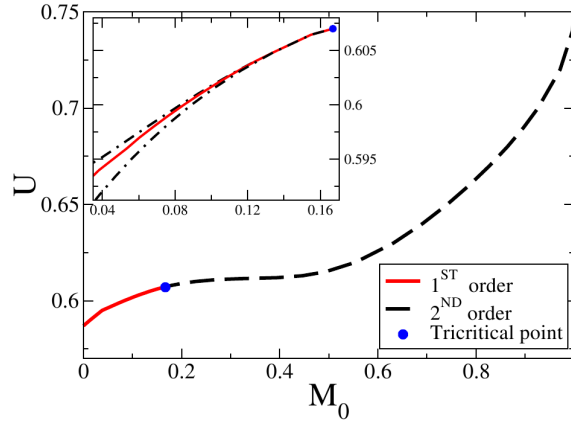


Figura 5.3 Figura retirada de [163] onde mostra-se equivocadamente no diagrama de fases do qSS um ponto tricrítico localizado onde $(U; M_0) \approx (0, 6075; 0, 165)$. (5.2) com $N = 1000$ partículas.

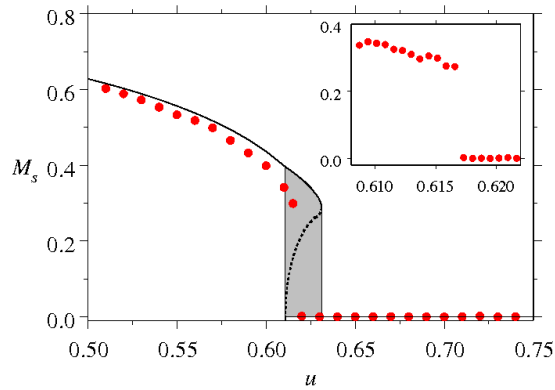


Figura 5.4 Figura retirada de [167] onde mostra-se a transição de fases correta de primeira ordem para o estado fora do equilíbrio; os pontos são resultado da simulação de N -corpos (5.2) com $N = 1000$ partículas e a linha representa a transição obtida pela teoria núcleo-halo (2.32) em (5.4) para $M_0 = 0, 4$.

maneira similar aos feixes de partículas carregadas e os sistemas auto-gravitantes nesse caso também mostra-se que a teoria baseada na relaxação violenta só tem aplicabilidade em uma região muito específica do espaço de parâmetros (condição virial).

A distribuição tipo núcleo-halo além de descrever bem a distribuição das partículas (spins) no espaço de fase (Fig. 5.5) aponta para uma transição de primeira ordem no estado quasi-estacionário. A teoria tem sido testada em outro modelo para interação de spins com uma possível fase nemática e tem mostrado-se satisfatória.

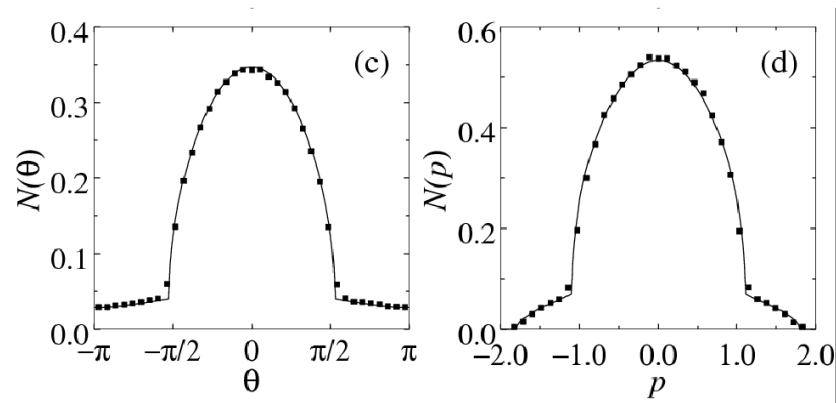


Figura 5.5 Figura retirada de [167] distribuição final em ângulo (c) e velocidades (d) segundo a teoria núcleo-halo (2.32). Os pontos são resultado da simulação dinâmica segundo (5.2) com $N = 10000$ partículas.

A principal publicação associada com esse capítulo é a referência [166] que encontra-se anexada ao final da tese.

Conclusões Gerais e Perspectivas

Analisamos o processo de relaxação em sistemas sujeitos a interações de longo alcance. Apesar de ser um tópico relativamente recente, sobre o ponto de vista da Mecânica Estatística o problema é demasiadamente antigo e fundamental para a compreensão do estado final ou estacionário atingido por um sistema após um processo de relaxação. O problema tem aplicações experimentais diretas tanto no campo da astrofísica como na física de plasmas e da física da matéria condensada. Por outro lado, o problema remete-nos a uma reanálise dos fundamentos da Mecânica Estatística de Gibbs bem como da Termodinâmica.

Em geral notamos que sistemas sujeitos a interações de longo alcance vão para estados quasi-estacionários cujo tempo de vida diverge com o número de partículas do sistema sendo que no limite termodinâmico esse estado quasi-estacionário torna-se de fato estacionário. Notamos de maneira bem clara, em todos os modelos analisados, a presença de dois estados estacionários bem definidos. Um bem descrito pela teoria da relaxação violenta e outro onde a teoria falha. Na sua grande maioria o estado estacionário apresenta uma separação de fases do tipo núcle-halo em geral bem descrito pela teoria apresentada no desenvolvimento da tese, Eq. 2.32. Além disso mostramos em que condições teorias baseadas na relaxação violenta podem ser utilizadas na descrição de sistemas com interações de longo alcance.

A teoria mostrou-se consistente no tratamento dos sistemas auto-gravitantes em todos os casos e dimensões; e nos plasmas não-neutros, como os que constituem os feixes de partículas carregadas. Desenvolvemos um método que de maneira satisfatória tem possibilitado definir a condição virial para sistemas com interações de longo alcance, mesmo quando o sistema está sujeito a um campo externo.

Analisamos o modelo HMF e mostramos que teorias baseadas no processo de relaxação violenta não devem ser empregadas na descrição da linha crítica de transição de fases. Em particular fomos conduzidos a duvidar da existência de ponto tri-crítico para o estado qSS no HMF. Mostramos ainda que a quebra de ergodicidade está intimamente vinculada à violação da condição virial no sistema. Mostramos a escala de tempo de relaxação para o equilíbrio nos sistemas auto-gravitantes em duas dimensões e nos plasmas não-neutros. Evidenciamos ainda que o mecanismo de relaxação é o mesmo no sistema em três dimensões.

Mostramos que se pensarmos no ensemble microcanônico como sendo aquele onde as partículas estão sujeitas a mover-se sob uma superfície de energia constante no espaço de fase os ensembles em geral são inequivalentes o que limita o uso da solução microcanônica para a descrição desses sistemas. Isso pelo menos deve introduzir uma cautela maior por

parte dos futuros professores ao lecionar a teoria dos ensembles estatísticos nos cursos Mecânica Estatística.

Ainda assim, alguns pontos ainda permanecem como perspectivas de futuros trabalhos:

- Analisar utilizando a teoria núcleo-halo a escala de tempo de relaxação para o equilíbrio em sistemas auto-gravitantes em uma dimensão.
- Estudar melhor as propriedades de equilíbrio nos feixes de partículas carregadas;
- Verificar, ou não, a presença de ponto tri-crítico para a transição de fase no HMF.
- Visitar outros sistemas físicos com interações de longo alcance, como os modelos de vórtices em hidrodinâmica e modelos para os chamados free-electron lasers.

Dinâmica Molecular

Dois pontos importante a serem abordados na dinâmica molecular são:

A.1 Simulação de Campo Médio

Considere a Eq. de Poisson (2.33) na forma adimensional escrita em termos de um campo vetorial $\mathcal{G}(\mathbf{r}) = -\nabla_d \psi(\mathbf{r})$ gerado por um conjunto discreto de cargas N ,

$$\nabla_d \cdot \mathcal{G}(\mathbf{r}) = -C_d \rho(\mathbf{r}), \quad (\text{A.1})$$

onde $\rho(\mathbf{r}) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d^d v$. Pelo teorema da divergência podemos escrever que,

$$\oint \mathcal{G}(\mathbf{r}) \cdot \hat{n} dS = -C_d \int_{V'} dV' \rho(\mathbf{r}') \quad (\text{A.2})$$

onde V' representa o volume limitado pela superfície fechada S , e \hat{n} o vetor normal nessa superfície. No limite em que o número de cargas $N \rightarrow \infty$ o campo tende a ter simetria azimutal, pois a distribuição de cargas com raio $r' < r$ tende ao contínuo. Nessas condições a simetria do campo é puramente radial e portanto a equação se reduz para,

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}) = -C_d \int_{V'} dV' \rho(\mathbf{r}') \quad (\text{A.3})$$

como a densidade $\rho(\mathbf{r})$ é normalizada a parte direita da integral representa na prática, para um conjunto discreto de partículas, o número de partículas $N_{<}$ contida no volume V' normalizada ao número total de partículas N ,

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}) = -\frac{N_{<}}{N} \frac{1}{r^{d-1}}, \quad (\text{A.4})$$

onde no caso unidimensional a aproximação já é exata por construção.

Para calcular $N_{<}$ criamos os vetores $r(i)$ e $n(i)$ de tamanho N cada de modo que $n(i)$ represente um vetor inteiro e ordenado com os índices associados a partícula na posição $r(i)$. Dessa forma em cada cálculo da aceleração, a partícula na posição $r(n(i))$ tem $j = n(i) - 1$ outras partículas com raios $r(j) < r(n(i))$. A escolha é baseada no fato de que entre dois cálculos da aceleração o vetor $n(i)$ não deve perder toda a ordenação ou seja, o vetor $n(i)$ permanece aproximadamente ordenado. Escolhemos o *insertion sort* pois nessas condições tem um tempo de ordenamento que pode escalar até com o número N de partículas.

A.2 Método de Integração

Quanto ao método de integração, utilizamos tanto um Runge-Kutta de quinta ordem com precisão fixa como o simplético de quarta com passo de tempo constante do tipo Yoshida [160, 161].

A escolha do método de integração quase sempre foi baseada na eficiência prática para cada caso de simulação proposta. Por exemplo nas simulações tipo campo médio em geral utilizamos o Runge-Kutta pois estávamos interessados somente em atingir o estado estacionário. Já nas simulações com colisão em que desejamos atingir o equilíbrio utilizamos o simplético para garantir a precisão na energia.

Nas simulações com o Runge-Kutta de quinta ordem fixamos a precisão de modo que o erro relativo na energia total fosse da ordem de 10^{-8} . Já simulações utilizando o simplético para garantir a mesmo erro absoluto fixamos o passo de tempo em $dt = 10^{-2}$.

Os códigos no início do doutoramento foram desenvolvidos em Fortran 77 e no final atualizamos para Fortran 90.

APÊNDICE B

Cálculo Numérico

O problema numérico envolve a solução da equação de Poisson (2.33) com os vínculos impostos pela dinâmica (2.28), ou seja,

$$\nabla_d^2 \psi(\mathbf{r}) = C_d \rho(\mathbf{r}) , \quad (\text{B.1})$$

$$\int E(\mathbf{r}, \mathbf{v}) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \alpha_1, \alpha_2) d^d \mathbf{r} d^d \mathbf{v} = \mathcal{E}_0 , \quad (\text{B.2})$$

$$\int f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \alpha_1, \alpha_2) d^d \mathbf{r} d^d \mathbf{v} = 1 , \quad (\text{B.3})$$

onde d representa a dimensão do problema, e $\rho(\mathbf{r}) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \alpha_1, \alpha_2) d^d \mathbf{v}$ a densidade devidamente normalizada. Os parâmetros $\{\alpha_1, \alpha_2\}$ representam os multiplicadores de Lagrange associados com a conservação da energia e normalização. Na teoria da relaxação violenta $\{\alpha_1, \alpha_2\}$ equivalem a $\{\beta, \mu\}$, (2.31), enquanto que na distribuição núcleo-halo equivale a $\{\epsilon_F, \chi\}$, (2.32). Utilizamos dois métodos para resolver numericamente esse conjunto de equações.

B.1 Método I

Reescrevendo (B.1) explicitamente em termos da derivada radial pela expressão para o operador de Laplace-Beltrami [131] encontramos,

$$\frac{1}{r^{d-1}} \frac{d}{dr} \left(r^{d-1} \frac{d\psi(r)}{dr} \right) - C_d \rho(r, \alpha_1, \alpha_2) = 0 , \quad (\text{B.4})$$

$$\int E(\mathbf{r}, \mathbf{v}) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \alpha_1, \alpha_2) d^d \mathbf{r} d^d \mathbf{v} - \mathcal{E}_0 = 0 , \quad (\text{B.5})$$

$$\int f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \alpha_1, \alpha_2) d^d \mathbf{r} d^d \mathbf{v} - 1 = 0 . \quad (\text{B.6})$$

Dessa forma, resolver o problema consiste em encontrar as três grandezas $\{\psi(r), \alpha_1, \alpha_2\}$ que resolvem as equações (B.4-B.6) simultaneamente. Para isso,

- Passo 1: Discretizamos o espaço em r , ou seja, construímos um vetor $r(i)$ entre 0 e uma posição máxima r_w , no caso dos feixes essa posição máxima equivale ao raio da parede.

- Passo 2: Escolhemos um valor tentativa para os multiplicadores de Lagrange α_{1_i} e α_{2_i} e definimos um perfil de densidade tentativa $\rho_i(\mathbf{r})$ para cada ponto $r(i)$. Esse perfil pode ser tanto uniforme como gaussiano contanto que esteja normalizado.
- Passo 3: Resolvemos a equação de Poisson por integração simples (método do trapézio) para o perfil de densidade $\rho_i(\mathbf{r})$ com a condição que em $r = 0$ tanto o potencial $\psi_i(r_i)$ quanto a derivada $\psi'_i(r_i)$ sejam nulos.

Por considerarmos um problema de condições de contorno como um problema de condição inicial precisamos reescalar o potencial de modo a satisfazer o contorno para o potencial ou seja, $\psi_i(r_i) = \psi_i(r_i) - \psi_i(r_w) + G(r_w)$, onde $G(r_w)$ representa o valor da função de Green para o problema no ponto $r = r_w$.

- Passo 4: Uma vez que já temos o potencial $\psi_i(r)$ e a densidade $\rho_i(r)$ em cada ponto do espaço definimos,

$$g_1(\alpha_1, \alpha_2) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \alpha_1, \alpha_2) d^d r d^d v - 1 \quad (\text{B.7})$$

e,

$$g_2(\alpha_1, \alpha_2) = \int E(\mathbf{r}, \mathbf{v}) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \alpha_1, \alpha_2) d^d r d^d v - \mathcal{E}_0 \quad (\text{B.8})$$

onde utilizamos o método do trapézio para calcular as integrais em posição e as integrais analíticas foram computadas numericamente pelo método de Gauss-Kronrod [128]. Para encontrar numericamente raízes das funções não lineares $g_1(\alpha_1, \alpha_2)$ e $g_2(\alpha_1, \alpha_2)$ utilizamos o pacote com código aberto (Minpack) [168, 169]. Grosseiramente falando o que esse pacote faz é simplesmente variar $(\alpha_{1_i}, \alpha_{2_i})$ de modo a encontrar os novos valores $(\alpha_{1_{i+1}}, \alpha_{2_{i+1}})$ tal que $g_1(\alpha_{1_{i+1}}, \alpha_{2_{i+1}}) = g_2(\alpha_{1_{i+1}}, \alpha_{2_{i+1}}) = 0$.

- Passo 5: Como $\alpha_{1_{i+1}}$ e $\alpha_{2_{i+1}}$ representam a solução para $\rho_i(r)$ recalculamos a integral $\rho_{i+1/2}(\mathbf{r}) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \alpha_{1_{i+1}}, \alpha_{2_{i+1}}) d^d v$ e com isso redefinimos a densidade $\rho_{i+1}(\mathbf{r}) = (1 - \gamma) \rho_i(\mathbf{r}) + \gamma \rho_{i+1/2}(\mathbf{r})$, com $\gamma \in]0; 1[$.
- Retornamos ao passo 3;

Iteramos até que,

$$\sum_{j=1}^2 |\alpha_{j_{i+1}} - \alpha_{j_i}| / |\alpha_{j_i}| \leq 10^{-8} . \quad (\text{B.9})$$

O parâmetro γ é introduzido para que a densidade $\rho_i(\mathbf{r})$ se aproxime gradativamente da solução do problema $\rho_f(\mathbf{r})$. O método mostra-se estável para vários valores de γ onde na maioria das situações utilizamos $\gamma = 0, 7$.

B.2 Método II

De maneira alternativa utilizando a parte radial para o operador de Laplace-Beltrami [131], podemos reescrever as Eqs. (B.1-B.3),

$$\psi''(r; \alpha_1, \alpha_2) = C_d \rho(r; \alpha_1, \alpha_2) - \frac{d-1}{r} \psi'(r; \alpha_1, \alpha_2), \quad (\text{B.10})$$

$$\mathcal{E}'(r; \alpha_1, \alpha_2) = C_d r^{d-1} \rho_E(r; \alpha_1, \alpha_2), \quad (\text{B.11})$$

$$\mathcal{N}'(r; \alpha_1, \alpha_2) = C_d r^{d-1} \rho(r; \alpha_1, \alpha_2), \quad (\text{B.12})$$

onde, $\rho_E(r; \alpha_1, \alpha_2) = \int E(\mathbf{r}, \mathbf{v}) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \alpha_1, \alpha_2) d^d \mathbf{v}$.

Dessa maneira as equações de vínculos (B.5, B.6) podem simplesmente ser reescritas numericamente como,

$$f_1(\alpha_1, \alpha_2) = \mathcal{N}(r_w; \alpha_1, \alpha_2) - 1 \quad (\text{B.13})$$

e,

$$f_2(\alpha_1, \alpha_2) = \mathcal{E}(r_w; \alpha_1, \alpha_2) - \mathcal{E}_0, \quad (\text{B.14})$$

onde as integrais analíticas são computadas de maneira similar ao método I.

Para efetuar as integrais e resolver a equação de Poisson utilizamos o algoritmo de integração similar ao utilizado na dinâmica molecular (Apêndice A). Nesse caso optamos por utilizar o Runge-Kutta de quinta ordem com precisão fixa.

- Passo 1: Determinamos um chute inicial para $\{\alpha_{10}, \alpha_{20}, \psi_i(r_w)\}$, e chamamos a rotina para encontrar numericamente raízes de funções não lineares (Minpack) [168, 169].
- Passo 2.0: Integramos somente a Eq. (B.10) de $r = 0$ até $r = r_w$, assumindo que o potencial e a derivada são nulos na origem ¹. Ao final da integração redefinimos o potencial na parede $\psi_{i+1}(r_w) = \psi_i(r_w)$ e recalculamos a equação de Poisson. Iteramos até que,

$$|\psi_{i+1}(r_w) - \psi_i(r_w)| / |\psi_i(r_w)| \leq 10^{-8} \quad (\text{B.15})$$

- Passo 2.1: Uma vez fixado $\psi(r_w)$ integramos novamente as Eqs. (B.10, B.11, B.12) e definimos as equações a serem zeradas pelo achador de raiz (B.13, B.14).

O método II aparentemente é mais simples e de certa forma mais elegante porém, do ponto de vista de convergência em todos os testes realizados o método I mostrou-se mais eficiente. A razão principal é que como nesse caso os multiplicadores não tem relação com os observáveis termodinâmicos a escolha do chute inicial basicamente determinava a velocidade de convergência do método. Nesse sentido o método I mostrou-se bem mais flexível que o método II.

¹É importante lembrar que nesse método de resolução todas as funções são calculadas simultaneamente com o cálculo do potencial. Isso significa que em cada momento onde aparece a função $\psi(r_i)$ é necessário que se faça a reescala $\psi(r_i) \rightarrow \psi(r_i) - \psi_i(r_w) + G(r_w)$.

Teorema Virial

O hamiltoniano de um sistema sujeito somente a forças internas é dado por

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{ij} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$$

onde \mathbf{p} é o *momentum* da partícula i e $V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ é o potencial de interação. A função virial I é definida por

$$I = \left\langle \sum_i \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{p}_i \right\rangle.$$

Tomando uma derivada no tempo, e usando as equações de Hamilton [114] obtemos que,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} I &= \left\langle \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{m} \right\rangle - \left\langle \sum_i \mathbf{r}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \tilde{V} \right\rangle \\ &= \sum_i \left\langle \frac{\mathbf{p}_i^2}{m} \right\rangle - \left\langle \sum_i \mathbf{r}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \tilde{V} \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

onde,

$$\tilde{V} = \frac{1}{2} \sum_{ij} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j).$$

Se \tilde{V} é uma função homogênea de ordem p

$$\tilde{V}(\mathbf{r}) = \lambda^{-p} \tilde{V}(\lambda \mathbf{r}),$$

pelo teorema de Euler [36] temos que,

$$p\tilde{V} = \sum_i \mathbf{r}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \tilde{V}.$$

Dessa forma, para um estado estacionário, $dI/dt = 0$, de modo que $2\mathcal{K} = p\langle \tilde{V} \rangle$, onde \mathcal{K} é a energia cinética média. Com isso, é fácil perceber que no caso de um sistema unidimensional, $p = 1$, a condição virial é dada simplesmente por $2\mathcal{K} = \langle \tilde{V} \rangle$. De maneira similar, no caso tridimensional, onde $p = -1$, obtemos o resultado usual em que $2\mathcal{K} = -\langle \tilde{V} \rangle$.

Por outro lado um caso interessante é o sistema em duas dimensões. Neste caso, \tilde{V} é uma soma de logaritmos e o teorema de Euler não se aplica diretamente. Ainda assim, podemos derivar um teorema virial em duas dimensões consideremos que

$$|\mathbf{r}|^p = e^{\ln |\mathbf{r}|^p} = e^{p \ln |\mathbf{r}|} , \quad (\text{C.2})$$

$$|\mathbf{r}|^p = 1 + p \ln |\mathbf{r}| + \dots , \quad (\text{C.3})$$

no limite ($p \rightarrow 0$) podemos considerar somente os primeiros dois termos na equação anterior, ou seja

$$\ln |\mathbf{r}| = \lim_{p \rightarrow 0} (|\mathbf{r}|^p / p - 1/p) . \quad (\text{C.4})$$

Dessa maneira escrevendo o potencial de interação como $V(\mathbf{r}) = 2Gm^2 \lim_{p \rightarrow 0} |\mathbf{r}|^p / p$ que é um logaritmo mais uma constante infinita, verificamos que $V(\mathbf{r})$ equivale simplesmente a uma função homogênea de ordem zero ($p = 0$) de modo que, podemos utilizar o teorema de Euler para escrever

$$Gm^2 N(N-1) = \sum_i \mathbf{r}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \tilde{V} \quad (\text{C.5})$$

Como o lado direito da equação somente contém derivadas do potencial a expressão é igualmente válida para $p = 0$ e portanto, para o potencial logarítmico. Substituindo (C.5) em (C.1), determinamos o teorema virial em duas dimensões,

$$\langle v^2 \rangle = GM \frac{N-1}{N} \quad (\text{C.6})$$

sendo que no limite termodinâmico, após reescalar as velocidades e por tudo na forma adimensional, obtemos $\langle v^2 \rangle = 1/2$, que representa a condição virial para o caso bidimensional.

Referências Bibliográficas

- [1] J. W. Gibbs, *Elementary principles in statistical mechanics: developed with especial reference to the rational foundation of thermodynamics*. Cambridge Univ Pr, 1902.
- [2] A. Campa, T. Dauxois, and S. Ruffo, “Statistical mechanics and dynamics of solvable models with long-range interactions,” *Physics Reports*, vol. 480, pp. 57–159, Sept. 2009.
- [3] D. Mukamel, S. Ruffo, and N. Schreiber, “Breaking of ergodicity and long relaxation times in systems with long-range interactions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, p. 240604, Dec 2005.
- [4] J. Kapteyn, “First attempt at a theory of the arrangement and motion of the sidereal system,” *Astrophysical Journal*, vol. 55, p. 302, 1922.
- [5] J. Jeans, “The motions of stars in a Kapteyn universe,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 82, pp. 122–132, 1922.
- [6] F. H. Oort, “The force exerted by stellar system in the direction perpendicular to the galactic plane and some related problems,” *Bulletin Of The Astronomical Institutes of the Netherlands*, vol. 6, p. 238, Aug. 1932.
- [7] G. Camm, “Self-gravitating star systems,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 110, p. 305, 1950.
- [8] K. Ogorodnikov, “Statistical mechanics of the simplest types of galaxies,” *Soviet Astronomy*, vol. 1, p. 748, 1957.
- [9] F. Hohl and J. W. Campbell, “Statistical mechanics of a collisionless self-gravitating system,” *The Astronomical Journal*, vol. 73, no. 7, p. 611, 1968.
- [10] F. Hohl, “Three-dimensional galaxy simulations,” *The Astronomical Journal*, vol. 83, no. 7, pp. 768–778, 1978.
- [11] J. Katz and D. Lynden-Bell, “The gravothermal instability in two dimensions,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 184, pp. 709–712, Sept. 1978.
- [12] T. Padmanabhan, “Statistical mechanics of gravitating systems,” *Physics Reports*, vol. 5, no. 5, pp. 285–362, 1990.

- [13] M.-a. Sakagami and N. Gouda, “On the collective relaxation in self-gravitating stellar systems,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 249, pp. 241–247, Mar. 1991.
- [14] H. Kandrup, “Violent relaxation, phase mixing, and gravitational Landau damping,” *The Astrophysical Journal*, vol. 500, p. 120, 1998.
- [15] A. H. Peter, C. E. Moody, and M. Kamionkowski, “Dark-matter decays and self-gravitating halos,” *Physical Review D*, vol. 81, p. 103501, May 2010.
- [16] X.-P. Huang and C. F. Driscoll, “Relaxation of 2D turbulence to a metaequilibrium near the minimum enstrophy state,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 72, pp. 2187–2190, Apr 1994.
- [17] P.-H. Chavanis, “Quasilinear theory of the 2D Euler equation,” *Physical Review Letters*, vol. 84, no. 24, pp. 5512–5515, 2000.
- [18] T. Andersen and C. Lim, “Negative specific heat in a quasi-2D Generalized vorticity model,” *Physical Review Letters*, vol. 99, p. 165001, Oct. 2007.
- [19] F. Bouchet, J. Barreé, A. Venaille, A. Campa, A. Giansanti, G. Morigi, and F. S. Labini, “Equilibrium and out of equilibrium phase transitions in systems with long range interactions and in 2D flows,” *AIP Conference Proceedings*, pp. 117–152, Feb. 2008.
- [20] C. Chen and R. C. Davidson, “Nonlinear properties of the Kapchinskij-Vladimirskij equilibrium and envelope equation for an intense charged-particle beam in a periodic focusing field,” *Physical Review E*, vol. 49, no. 6, p. 5679, 1994.
- [21] R. C. Davidson and H. Qin, *Physics of intense charged particle beams in high energy accelerators*. World Scientific, Singapore, 1st ed., 2001.
- [22] I. D. Kaganovich, R. C. Davidson, M. a. Dorf, E. a. Startsev, a. B. Sefkow, E. P. Lee, and A. Friedman, “Physics of neutralization of intense high-energy ion beam pulses by electrons,” *Physics of Plasmas*, vol. 17, no. 5, p. 056703, 2010.
- [23] J. Barré, F. Bouchet, T. Dauxois, and S. Ruffo, “Large deviation techniques applied to systems with long-range interactions,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 119, pp. 677–713, May 2005.
- [24] A. Antoniazzi, Y. Elskens, D. Fanelli, and S. Ruffo, “Statistical mechanics and Vlasov equation allow for a simplified hamiltonian description of single-pass free electron Laser saturated dynamics,” *The European Physical Journal B*, vol. 50, pp. 603–611, May 2006.
- [25] M. Kastner, “Diverging equilibration times in long-range quantum spin models,” *Physical Review Letters*, vol. 106, pp. 1–4, Mar. 2011.

- [26] A. Ramírez-Hernández, H. Larralde, and F. Leyvraz, “Violation of the zeroth law of thermodynamics in systems with negative specific heat,” *Physical Review Letters*, vol. 100, p. 120601, Mar. 2008.
- [27] A. Ramírez-Hernández, H. Larralde, and F. Leyvraz, “Systems with negative specific heat in thermal contact: Violation of the zeroth law,” *Physical Review E*, vol. 78, pp. 1–8, Dec. 2008.
- [28] K. Michaelian, I. Santamaría-Holek, and A. Pérez-Madrid, “Comment on “Violation of the zeroth law of thermodynamics in systems with negative specific heat”,” *Physical Review Letters*, vol. 102, p. 138901, Apr. 2009.
- [29] L. Pogliani and M. Berberan-Santos, “Constantin Carathéodory and the axiomatic thermodynamics,” *Journal of Mathematical Chemistry*, vol. 28, pp. 313–324, 2000.
- [30] J. L. Lebowitz and O. Penrose, “Modern ergodic theory,” *Physics Today*, vol. 26, pp. 155–175, Feb. 1973.
- [31] J. Lebowitz and H. Spohn, “On the time evolution of macroscopic systems,” *Communications on Pure and Applied Mathematics*, vol. 36, pp. 595–613, Sept. 1983.
- [32] J. L. Lebowitz, “Macroscopic laws, microscopic dynamics, time’s arrow and Boltzmann’s entropy,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 194, pp. 1–27, Mar. 1993.
- [33] J. L. Lebowitz, *25 Years of non-equilibrium statistical mechanics*, vol. 445 of *Lecture Notes in Physics*, ch. Microscopic reversibility and macroscopic behavior: Physical explanations and mathematical derivations, pp. 1–20. Springer, 1995.
- [34] D. K. Clark, *Mechanical Theory of Heat*, vol. 70. London, Sept. 1860.
- [35] O. Penrose, “Foundations of statistical mechanics,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 42, no. 12, pp. 1937–2007, 1979.
- [36] H. B. Callen, *Thermodynamics and an introduction to thermostatistics*. John Wiley & Sons, 2nd ed., 1985.
- [37] K. Huang, *Statistical Mechanics*. John Wiley & Sons, 2nd ed., 1987.
- [38] D. Ruelle, *Statistical Mechanics*. Gauthier, 1st ed., 1969.
- [39] D. Mukamel, “Statistical mechanics of systems with long range interactions,” in *Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long-Range Interactions: Theory and Experiments*. (A. Campa, A. Giansanti, G. Morigi, and F. Sylos Labini, eds.), vol. 31 of *AIP Conference Proceedings*, pp. 22–38, 2008.
- [40] M. Fisher, S.-k. Ma, and B. Nickel, “Critical exponents for long-range interactions,” *Physical Review Letters*, vol. 29, pp. 917–920, Oct. 1972.

- [41] F. Dyson, “Existence of a phase-transition in a one-dimensional Ising ferromagnet,” *Communications in Mathematical Physics*, vol. 12, 1969.
- [42] R. Carlberg, “The phase space density in elliptical galaxies,” *The Astrophysical Journal*, vol. 310, pp. 593–596, 1986.
- [43] A. M. Salzberg, “Exact statistical thermodynamics of gravitational interactions in one and two dimensions,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 6, no. 1, p. 158, 1965.
- [44] S. Cuperman, S. Goldstein, and M. Lecar, “Numerical experimental check of Lynden-Bell statistics-II. The core-halo structure and the role of the violent relaxation,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 146, pp. 161–169, 1969.
- [45] A. Lenard, “Exact statistical mechanics of a one-dimensional system with coulomb forces,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 2, no. 5, p. 682, 1961.
- [46] S. F. Edwards and A. Lenard, “Exact statistical mechanics of a one-dimensional system with Coulomb Forces. II. The method of functional integration,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 3, no. 4, pp. 778–792, 1962.
- [47] O. Eldridge and M. Feix, “Numerical experiments with a plasma model,” *Physics of Fluids*, vol. 6, no. 3, p. 398, 1963.
- [48] M. J. Stephen, “Oscillations of a plasma in a magnetic field,” *Physical Review*, vol. 129, no. 3, pp. 997–1004, 1963.
- [49] S. Rand, “Collision damping of electron plasma waves,” *Physics of Fluids*, vol. 8, no. 1, p. 143, 1965.
- [50] B. B. Kadomtsev and O. P. Pogutse, “Collisionless relaxation in systems with coulomb interactions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 25, pp. 1155–1157, Oct 1970.
- [51] A. I. Khinchin, *Mathematical Foundations of Statistical Mechanics*. Dover, 1st ed., 1960.
- [52] S. Chandrasekhar, “Stochastic problems in physics and astronomy,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 15, pp. 1–89, Jan 1943.
- [53] M. Hénon, “L’évolution initiale d’un amas sphérique,” in *Annales d’Astrophysique*, vol. 27, p. 83, 1964.
- [54] R. Woolley, “Motions of stars of type A perpendicular to the galactic plane,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 117, no. 2, pp. 198–211, 1957.

- [55] A. Toomre, “On the gravitational stability of a disk of stars,” *Astrophysical Journal*, vol. 139, pp. 1217–1238, 1964.
- [56] F. Hohl and M. R. Feix, “Numerical experiments with a one-dimensional model for a self-gravitating star system,” *Astrophysical Journal*, vol. 147, pp. 1164–1179, 1967.
- [57] M. Antoni and S. Ruffo, “Clustering and relaxation in Hamiltonian long-range dynamics,” *Physical Review E*, vol. 52, pp. 2361–2374, Sept. 1995.
- [58] K. Jain, F. Bouchet, and D. Mukamel, “Relaxation times of unstable states in systems with long range interactions,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2007, pp. P11008–P11008, Nov. 2007.
- [59] S. Gupta and D. Mukamel, “Slow Relaxation in Long-Range Interacting Systems with Stochastic Dynamics,” *Physical Review Letters*, vol. 105, pp. 1–4, July 2010.
- [60] P. H. Chavanis, “Gravitational instability of slowly rotating isothermal spheres,” *Astronomy and Astrophysics*, vol. 396, pp. 315–329, Dec. 2002.
- [61] R. Bachelard, T. Benzekri, C. Chandre, X. Leoncini, and M. Vittot, “Targeted mixing in an array of alternating vortices,” *Physical Review E*, vol. 76, pp. 1–14, Oct. 2007.
- [62] P. de Buyl, D. Mukamel, and S. Ruffo, “Self-consistent steady states in Hamiltonian mean field dynamics,” *Arxiv preprint arXiv:1012.2594*, p. 4, Dec. 2010.
- [63] P. de Buyl, D. Mukamel, and S. Ruffo, “Self-consistent inhomogeneous steady states in hamiltonian mean-field dynamics,” *Phys. Rev. E*, vol. 84, p. 061151, Dec 2011.
- [64] M. J. Klein, “Principle of detailed balance,” *Physical Review*, vol. 97, pp. 1446–1447, Mar. 1955.
- [65] J. Barré, D. Mukamel, and S. Ruffo, “Inequivalence of ensembles in a system with long-range interactions,” *Physical Review Letters*, vol. 87, p. 30601, June 2001.
- [66] A. Lederhender and D. Mukamel, “Long-range correlations and ensemble inequivalence in a generalized ABC model,” *Physical Review Letters*, vol. 105, pp. 150602–1–150602–4, June 2010.
- [67] D. Lynden-Bell, “Statistical mechanics of violent relaxation in stellar systems,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 136, pp. 101–121, 1967.
- [68] K. Michaelian and I. Santamaría-Holek, “Critical analysis of negative heat capacity in nanoclusters,” *Europhysics Letters (EPL)*, vol. 79, p. 43001, Aug. 2007.
- [69] M. Kiessling and T. Neukirch, “Negative specific heat of a magnetically self-confined plasma torus,” *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, vol. 100, no. 4, p. 1510, 2003.

- [70] W. Thirring, H. Narnhofer, and H. Posch, “Negative specific heat, the thermodynamic limit, and ergodicity,” *Physical Review Letters*, vol. 91, p. 130601, Sept. 2003.
- [71] S. Ruffo, “Equilibrium and nonequilibrium properties of systems with long-range interactions,” *The European Physical Journal B*, vol. 64, pp. 355–363, Feb. 2008.
- [72] F. Bouchet and J. Barré, “Statistical mechanics of systems with long range interactions,” *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 31, pp. 18–26, Mar. 2006.
- [73] A. Campa, A. Giansanti, D. Mukamel, and S. Ruffo, “Dynamics and thermodynamics of rotators interacting with both long-and short-range couplings,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 365, no. 1, pp. 120–127, 2006.
- [74] T. Dauxois, P. de Buyl, L. Lori, and S. Ruffo, “Models with short- and long-range interactions: the phase diagram and the reentrant phase,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2010, p. P06015, June 2010.
- [75] I. Arad and D. Lynden-Bell, “Inconsistency in theories of violent relaxation,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 361, pp. 385–395, Aug. 2005.
- [76] G. de Vaucouleurs, “Recherches sur les nebuleuses extragalactiques,” *Annales d’Astrophysique*, vol. 11, p. 247, Jan. 1948.
- [77] J. L. Sérsic, “Influence of the atmospheric and instrumental dispersion on the brightness distribution in a galaxy,” *Boletín de la Asociación Argentina de Astronomía La Plata Argentina*, vol. 6, p. 41, 1963.
- [78] J. Hjorth and J. Madsen, “Small deviations from the $r^{1/4}$ law, the fundamental plane, and phase densities of elliptical galaxies,” *The Astrophysical Journal*, vol. 445, pp. 55–61, May 1995.
- [79] J. F. Navarro, C. S. Frenk, and S. D. M. White, “The structure of cold dark matter halos,” *The Astrophysical Journal*, vol. 462, p. 563, May 1996.
- [80] J. F. Navarro, C. S. Frenk, and S. D. White, “A Universal density profile from hierarchical clustering,” *The Astrophysical Journal*, vol. 490, no. 1, pp. 493–508, 1997.
- [81] L. L. R. Williams and J. Hjorth, “Statistical mechanics of collisionless orbits. II. Structure of halos,” *The Astrophysical Journal*, vol. 722, pp. 856–861, Oct 2010.
- [82] L. L. R. Williams, J. Hjorth, and R. Wojtak, “Statistical mechanics of collisionless orbits. III. Comparison with N-body simulations,” *The Astrophysical Journal*, vol. 725, p. 282, Dec. 2010.

- [83] Y. Levin, R. Pakter, and T. Teles, “Collisionless relaxation in non-neutral plasmas,” *Physical Review Letters*, vol. 100, p. 040604, Jan. 2008.
- [84] J. Hjorth and J. Madsen, “Statistical mechanics of galaxies,” *MNRAS*, vol. 265, p. 237, Nov. 1993.
- [85] Y. Yamaguchi, J. Barré, F. Bouchet, T. Dauxois, and S. Ruffo, “Stability criteria of the Vlasov equation and quasi-stationary states of the HMF model,” *Physica A: Statistical and Theoretical Physics*, vol. 337, no. 1-2, pp. 36–66, 2004.
- [86] Y. Y. Yamaguchi, “One-dimensional self-gravitating sheet model and Lynden-Bell statistics,” *Physical Review E*, vol. 78, pp. 1–9, Oct. 2008.
- [87] D. Bindoni and L. Secco, “Violent relaxation in phase-space,” *New Astronomy Reviews*, vol. 52, pp. 1–18, May 2008.
- [88] J. Barré and Y. Yamaguchi, “Small traveling clusters in attractive and repulsive Hamiltonian mean-field models,” *Physical Review E*, vol. 79, pp. 036208–1–036208–4, Mar. 2009.
- [89] L. Milanović, H. A. Posch, and W. Thirring, “Gravitational collapse and ergodicity in confined gravitational systems,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 124, pp. 843–858, May 2006.
- [90] M. Kac, “On the partition function of a one-dimensional gas,” *Physics of Fluids*, vol. 2, no. 1, pp. 8–12, 1959.
- [91] R. Kawahara and H. Nakanishi, “Slow Relaxation in two-dimensional electron plasma under strong magnetic field,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 76, p. 074001, June 2007.
- [92] A. A. Vlasov, “The vibrational properties of an electron gas,” *Soviet Physics Uspekhi*, vol. 10, pp. 721–733, June 1968.
- [93] J. Binney and S. Tremaine, *Galactic dynamics*. Princeton Univ. Press, 2nd ed., 2009.
- [94] J. Aly, “Thermodynamics of a two-dimensional self-gravitating system,” *Physical Review E*, vol. 49, no. 5, pp. 3771–3783, 1994.
- [95] N. Brown and M. Reiser, “Thermal equilibrium of bunched charged particle beams,” *Physics of Plasmas*, vol. 2, no. 3, p. 965, 1995.
- [96] J.-J. Aly and J. Perez, “Thermodynamics of a two-dimensional unbounded self-gravitating system,” *Physical Review E*, vol. 60, pp. 5185–5190, Nov. 1999.
- [97] W. C. Saslaw, *The distribution of the galaxies: gravitational clustering in cosmology*. Cambridge Univ. Press, 1st ed., 2000.

- [98] W. Braun and K. Hepp, “The Vlasov dynamics and its fluctuations in the $1/N$ limit of interacting classical particles,” *Communications in Mathematical Physics*, vol. 56, pp. 101–113, June 1977.
- [99] P.-H. Chavanis, “Kinetic equations for systems with long-range interactions: a unified description,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2010, p. P05019, May 2010.
- [100] A. Ishihara, *Statistical Physics*. Academic Press, NY & London, 1st ed., 1971.
- [101] T. R. Filho, A. Figueiredo, and M. Amato, “Entropy of classical systems with long-range interactions,” *Physical Review Letters*, vol. 95, p. 190601, Nov. 2005.
- [102] P. Chavanis and F. Bouchet, “On the coarse-grained evolution of collisionless stellar systems,” *Astronomy and Astrophysics*, vol. 430, pp. 771–778, Feb. 2005.
- [103] A. Antoniazzi, F. Califano, D. Fanelli, and S. Ruffo, “Exploring the thermodynamic limit of hamiltonian models: convergence to the Vlasov equation,” *Physical Review Letters*, vol. 98, pp. 150602–1–150602–4, Apr. 2007.
- [104] C. Z. Cheng and G. Knorr, “The integration of the Vlasov equation in configuration space,” *Journal of Computational Physics*, vol. 22, pp. 330–351, Nov. 1976.
- [105] E. Fijalkow, “A numerical solution to the Vlasov equation,” *Computer Physics Communications*, vol. 116, pp. 319–328, Feb. 1999.
- [106] A. Gorban, *Model reduction and coarse-graining approaches for multiscale phenomena*, ch. Basic types of coarse-graining, p. 117. Springer, Berlin, 2006.
- [107] C.-S. Wu, “Landau Damping and Resonant Energy Absorption,” *Physical Review*, vol. 127, pp. 1419–1422, Sept. 1962.
- [108] D. Sagan, “On the physics of Landau damping,” *American Journal of Physics*, vol. 62, no. 5, p. 450, 1994.
- [109] D. Rose, T. Genoni, D. Welch, E. Startsev, and R. Davidson, “Two-stream instability analysis for propagating charged particle beams with a velocity tilt,” *Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams*, vol. 10, pp. 3417–3419, Mar. 2007.
- [110] T. N. Teles, R. Pakter, and Y. Levin, “Relaxation and emittance growth of a thermal charged-particle beam,” *Applied Physics Letters*, vol. 95, no. 17, p. 173501, 2009.
- [111] T. N. Teles, R. Pakter, and Y. Levin, “Emittance growth and halo formation in the relaxation of mismatched beams,” *Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams*, vol. 13, pp. 1–8, Nov. 2010.
- [112] T. Yamashiro, N. Gouda, and M. Sakagami, “Origin of core-halo structure in one-dimensional self-gravitating system,” *Progress of Theoretical Physics*, vol. 88, pp. 269–282, Aug. 1992.

- [113] C. Bohn and I. Sideris, “Chaotic orbits in thermal-equilibrium beams: Existence and dynamical implications,” *Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams*, vol. 6, pp. 1–15, Mar. 2003.
- [114] H. Goldstein, C. P. Poole, and J. L. Safko, *Classical Mechanics*. Addison Wesley, 3rd ed., 2001.
- [115] P. Jabin and A. Gerschenfeld, “Mean field limit for interacting particles.” online (accessed 23/05/2012), 2004.
- [116] Y. Levin, X. Li, and M. Fisher, “Coulombic criticality in general dimensions,” *Physical review letters*, 1994.
- [117] Y. Levin, R. Pakter, and F. Rizzato, “Collisionless relaxation in gravitational systems: From violent relaxation to gravothermal collapse,” *Physical Review E*, vol. 78, p. 021130, Aug. 2008.
- [118] H. Wright, B. Miller, and W. Stein, “The relaxation time of a one-dimensional self-gravitating system,” *Astrophysics and Space Science*, vol. 84, no. 2, pp. 421–429, 1982.
- [119] S. D. Mathur, “Existence of oscillation modes in collisionless gravitating systems,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 243, pp. 529–536, Apr. 1990.
- [120] M. Joyce and T. Worrakitpoonpon, “Relaxation to thermal equilibrium in the self-gravitating sheet model,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2010, p. P10012, Oct. 2010.
- [121] M. Joyce and T. Worrakitpoonpon, “Quasi-stationary states in the self-gravitating sheet model,” *Arxiv preprint arXiv:1012.5042*, p. 16, Dec. 2010.
- [122] B. N. Miller and J.-L. Rouet, “Development of fractal geometry in a one-dimensional gravitational system,” *Comptes Rendus Physique*, vol. 7, pp. 383–390, Apr. 2006.
- [123] B. Miller, J.-L. Rouet, and E. Le Guirriec, “Fractal geometry in an expanding, one-dimensional, newtonian universe,” *Physical Review E*, vol. 76, pp. 1–14, Sept. 2007.
- [124] B. N. Miller and J.-L. Rouet, “Cosmology in one dimension: fractal geometry, power spectra and correlation,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2010, p. P12028, Dec. 2010.
- [125] M. Joyce and F. Sicard, “Non-linear gravitational clustering of cold matter in an expanding universe: indications from 1D toy models,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 000, p. 9, Dec. 2010.

- [126] A. Noullez, D. Fanelli, and E. Aurell, “A heap-based algorithm for the study of one-dimensional particle systems,” *Journal of Computational Physics*, vol. 186, no. 2, pp. 697 – 703, 2003.
- [127] V. Skarka and P. Coveney, “Solution of the linearised Vlasov equation for collisionless plasmas evolving in external fields of arbitrary spatial and time dependence. I,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 23, no. 12, pp. 2439–2461, 1990.
- [128] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Fortran numerical recipes*. Cambridge Univ. Press, 2nd ed., 1992.
- [129] Y. Levin, “Electrostatic correlations: from plasma to biology,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 65, pp. 1577–1632, Nov. 2002.
- [130] D. G. Duffy, *Green’s functions with applications*. Studies in Advanced Mathematics, CRC Press, 2001.
- [131] G. B. Arfken, H. J. Weber, and F. Harris, *Mathematical methods for physicists*. Elsevier, 5nd ed., 2001.
- [132] W. Simeoni, F. B. Rizzato, and R. Pakter, “Nonlinear coupling between breathing and quadrupole-like oscillations in the transport of mismatched beams in continuous magnetic focusing fields,” *Physics of Plasmas*, vol. 13, no. 6, p. 063104, 2006.
- [133] F. B. Rizzato, R. Pakter, and Y. Levin, “Wave breaking and particle jets in intense inhomogeneous charged beams,” *Physics of Plasmas*, vol. 14, no. 11, p. 110701, 2007.
- [134] F. B. Rizzato, R. Pakter, and Y. Levin, “Driven one-component plasmas,” *Phys. Rev. E*, vol. 80, p. 021109, Aug 2009.
- [135] A. Gabrielli and M. Joyce, “Gravitational force in an infinite one-dimensional Poisson distribution,” *Physical Review E*, vol. 81, pp. 1–9, Feb. 2010.
- [136] A. Gabrielli, M. Joyce, and B. Marcos, “Quasistationary states and the range of pair interactions,” *Physical Review Letters*, vol. 105, pp. 1–4, Nov. 2010.
- [137] A. Doroshkevich, E. Kotok, I. Novikov, A. Poliudov, S. Shandarin, and Y. S. Sigov, “Two-dimensional simulation of the gravitational system dynamics and formation of the large-scale structure of the universe,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 192, pp. 321–337, 1980.
- [138] J. Ostriker, “The equilibrium of polytropic and isothermal cylinders.,” *The Astrophysical Journal*, vol. 140, p. 1056, Oct. 1964.

- [139] T. N. Teles, Y. Levin, R. Pakter, and F. B. Rizzato, “Statistical mechanics of unbound two-dimensional self-gravitating systems,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2010, p. P05007, May 2010.
- [140] T. N. Teles, Y. Levin, and R. Pakter, “Statistical mechanics of 1D self-gravitating systems: the core-halo distribution,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society: Letters*, vol. 417, pp. L21–L25, Oct. 2011.
- [141] D. DuBois, V. Gilinsky, and M. Kivelson, “Collision damping of plasma oscillations,” *Physical Review Letters*, vol. 8, pp. 419–421, June 1962.
- [142] R. Balescu, “Equilibrium and non-equilibrium statistical mechanics,” *NASA STI Recon Technical Report A*, 1975.
- [143] M. Reiser, “Free energy and emittance growth in nonstationary charged particle beams,” *Journal of Applied Physics*, vol. 70, no. 4, pp. 1919–1923, 1991.
- [144] R. P. Nunes, R. Pakter, and F. B. Rizzato, “Simplified self-consistent model for emittance growth in charged beams with mismatched envelopes,” *Physics of Plasmas*, vol. 14, no. 2, p. 023104, 2007.
- [145] R. Gluckstern, “Analytic model for halo formation in high current ion linacs,” *Physical Review Letters*, vol. 73, pp. 1247–1250, Aug. 1994.
- [146] H. Okamoto and M. Ikegami, “Simulation study of halo formation in breathing round beams,” *Phys. Rev. E*, vol. 55, pp. 4694–4705, Apr 1997.
- [147] T. P. Wangler, K. R. Crandall, R. Ryne, and T. S. Wang, “Particle-core model for transverse dynamics of beam halo,” *Physical Review Special Topics – Accelerators and Beams*, vol. 1, no. 8, p. 84201, 1998.
- [148] C. Chen and R. Pakter, “Mechanisms and control of beam halo formation in intense microwave sources and accelerators,” *Physics of Plasmas*, vol. 7, no. 5, pp. 2203–2214, 2000.
- [149] C. Allen, K. Chan, P. Colestock, K. Crandall, R. Garnett, J. Gilpatrick, W. Lysenko, J. Qiang, J. Schneider, M. Schulze, R. Sheffield, H. Smith, and T. Wangler, “Beam-halo measurements in high-current proton beams,” *Physical Review Letters*, vol. 89, pp. 18–21, Nov. 2002.
- [150] M. Hess and C. Chen, “Confinement criterion for a highly bunched beam,” *Physics of Plasmas*, vol. 7, no. 12, pp. 5206–5213, 2000.
- [151] J. S. Moraes, R. Pakter, and F. B. Rizzato, “Equilibrium and stability of off-axis periodically focused particle beams,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 93, p. 244801, Dec 2004.

- [152] M. Hess, “Off-axis space-charge limit for a bunched electron beam in a coaxial conducting structure,” *Plasma Science, IEEE Transactions on*, vol. 36, pp. 729–734, June 2008.
- [153] L. C. Martins, F. B. Rizzato, and R. Pakter, “Off-axis stability of intense continuous relativistic beams,” *Journal of Applied Physics*, vol. 106, no. 4, p. 043305, 2009.
- [154] S. Bernal, R. A. Kishek, M. Reiser, and I. Haber, “Observations and simulations of transverse density waves in a collimated space-charge dominated electron beam,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 82, pp. 4002–4005, May 1999.
- [155] S. G. Anderson and J. B. Rosenzweig, “Non equilibrium transverse motion and emittance growth in ultra-relativistic space-charge dominated beams,” *Phys. Rev. ST Accel. Beams*, vol. 3, p. 094201, Sep 2000.
- [156] S. M. Lund, D. P. Grote, and R. C. Davidson, “Simulations of beam emittance growth from the collective relaxation of space-charge nonuniformities,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 544, no. 1–2, pp. 472 – 480, 2005.
- [157] B. L. Qian, J. Zhou, and C. Chen, “Image-charge effects on the envelope dynamics of an unbunched intense charged-particle beam,” *Phys. Rev. ST Accel. Beams*, vol. 6, p. 014201, Jan 2003.
- [158] J. Zhou, B. L. Qian, and C. Chen, “Chaotic particle motion and beam halo formation induced by image-charge effects in a small-aperture alternating-gradient focusing system,” *Physics of Plasmas*, vol. 10, no. 11, pp. 4203–4206, 2003.
- [159] R. Pakter, Y. Levin, and F. B. Rizzato, “Image effects on the transport of intense nonaxisymmetric charged beams,” *Applied Physics Letters*, vol. 91, no. 25, p. 251503, 2007.
- [160] E. Hairer, C. Lubich, and G. Wanner, *Geometric numerical integration: structure-preserving algorithms for ordinary differential equations*. Springer-Verlag, 2nd ed., 2005.
- [161] E. Hairer, S. P. Norsett, and G. Wanner, *Solving ordinary differential equations I: nonstiff problems*. Springer-Verlag, 2nd ed., 2008.
- [162] A. Gabrielli, M. Joyce, B. Marcos, and F. Sicard, “A dynamical classification of the range of pair interactions,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 141, pp. 970–989, Nov. 2010.
- [163] A. Antoniazzi, D. Fanelli, S. Ruffo, and Y. Y. Yamaguchi, “Non equilibrium tricritical point in a system with long-range interactions,” *Physical Review Letters*, vol. 99, pp. 2–5, July 2007.

- [164] R. Bachelard, T. Manos, P. de Buyl, F. Staniscia, F. Cataliotti, G. De Ninno, D. Fanelli, and N. Piovella, “Experimental perspectives for systems based on long-range interactions,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2010, p. P06009, June 2010.
- [165] P. de Buyl, D. Mukamel, and S. Ruffo, “Statistical mechanics of collisionless relaxation in a non-interacting system.,” *Philosophical transactions. Series A, Mathematical, physical, and engineering sciences*, vol. 369, pp. 439–52, Jan. 2011.
- [166] F. Benetti, T. Teles, R. Pakter, and Y. Levin, “Ergodicity breaking and parametric resonances in systems with long-range interactions,” *Physical Review Letters*, vol. 108, Apr. 2012.
- [167] R. Pakter and Y. Levin, “Core-halo distribution in the hamiltonian mean-field model,” *Physical Review Letters*, vol. 106, p. 200603, May 2011.
- [168] J. J. Moré, B. S. Garbow, and K. E. Hillstrom, “User guide for MINPACK,” tech. rep., Argonne, IL, USA, aug 1980.
- [169] R. C. Wayne, ed., *Sources and development of mathematical software*. Prentice-Hall Series in Computational Mathematics, Cleve Moler, Advisor, Upper Saddle River, NJ 07458, USA: Prentice-Hall, 1984.