Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Teoria Cinética de Mapas Hamiltonianos

Roberto Venegeroles Nascimento

Tese apresentada ao Instituto de Física da
Universidade de São Paulo para a
obtenção do grau de Doutor em Ciências

Orientador: Prof. Dr. Mahir Saleh Hussein (IF-USP)

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Clodoaldo Grotta Ragazzo (IME-USP)
Prof. Dr. Mahir Saleh Hussein (IF-USP)
Prof. Dr. Marcus Aloizio Martinez de Aguiar (IFGW-UNICAMP)
Prof. Dr. Ricardo Schwartz Schor (ICEX-UFMG)
Prof. Dr. Walter Felipe Wreszinski (IF-USP)

São Paulo, 2007

FICHA CATALOGRÁFICA
Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Nascimento, Roberto Venegeroles
Teoria Cinética de Mapas Hamiltonianos.

Tese (Doutorado) - Universidade de São Paulo.
Instituto de Física – Departamento de Física Matemática.

Orientador: Prof. Dr. Mahir Saleh Hussein.

Área de Concentração: Física.

Unitermos: 1. Sistemas Dinâmicos; 2. Caos (Sistemas
Dinâmicos); 3. Difusão; 4. Teoria Cinética.

USP/IF/SBI-033/2007

Este trabalho teve o auxílio financeiro da CAPES

*¡Ay de aquel que navega, el cielo oscuro, por mar no usado y peligrosa vía,
adonde norte o puerto no se ofrece!
Don Quijote, cap. XXXIV*

Prefácio

A idéia de que sistemas determinísticos que exibem dependência sensível às condições iniciais pudessem receber tratamento probabilístico analítico sempre me fascinou. O tema da presente tese já havia nascido para mim quando deparei-me pela primeira vez com o trabalho de Rechester, Rosenbluth e White por meio de leituras do já célebre *Regular and Chaotic Dynamics*, de Lichtenberg e Lieberman.

A proposta inicial do projeto era a de se estudar certos aspectos da teoria do caos quântico por meio dos chamados *ensembles deformados de matrizes aleatórias*, projeto cuidadosamente elaborado por meu orientador, Professor Mahir Saleh Hussein. Durante minha mudança de um porto seguro para uma teimosia pessoal, pude contar com a compreensão generosa desse renomado cientista. Agradeço ao Professor Hussein pela orientação e confiança e espero, em retribuição, que este pequeno trabalho tenha boa aceitação entre futuros leitores.

Agradeço também à **CAPES** pelo suporte financeiro que possibilitou a realização desse trabalho.

O Professor Alberto Saa fez leituras críticas de alguns dos manuscritos que viriam a compor esta tese. Pude contar com suas excelentes sugestões, além de sua enorme paciência. Sem sombra de dúvida, foi um grande incentivador deste trabalho. O Professor Walter Wreszinski recebeu-me inúmeras vezes em sua sala para compartilhar generosamente de seu vasto conhecimento em Física Teórica e Matemática. O Professor Elcio Abdalla, mesmo não participando diretamente dos temas, foi uma companhia charmosa e estimulante durante os almoços e cafés que tivemos entre amigos. A todos eles, registro aqui minha imensa gratidão.

Gostaria de agradecer a ajuda que tive de alguns amigos de pós-graduação do IFUSP: Carlos Amado Pires é um amigo de longa data que me ajudou bastante com dicas sobre os programas *Origin* e *Mathematica*. André Lahun foi meu colega de sala por dois anos e ajudou-me com o *Miktex*. Gilson da Silva passou-me ótimas dicas de *Fortran*. Marcelo Pires e Leonardo Sioufi, por serem os sujeitos mais simpáticos do “corredor dos pós-graduandos” do Departamento de Física Matemática.

Agradeço também às secretárias do Departamento, Amélia, Simone e Bete, sempre dispostas a resolver nossos problemas com muita simpatia e bom humor.

Por fim, mas em primeiro lugar, agradeço amorosamente minha esposa, Luciana, e nosso filho, André, pelo imenso carinho e pelo precioso tempo cedido na confecção deste trabalho.

Resumo

Este trabalho consiste do estudo das propriedades de transporte de sistemas dinâmicos caóticos por meio do uso de técnicas de operadores de projeção. Tais sistemas podem exibir difusão determinística e relaxação para o equilíbrio. Mostramos que esse comportamento difusivo pode ser visto como uma propriedade espectral do operador de Perron-Frobenius associado. Em particular, a ressonância dominante de Pollicott-Ruelle é calculada analiticamente para uma classe geral de mapas que preservam área. Sua dependência do número de onda determina os coeficientes de transporte normais. Calculamos uma fórmula geral exata para o coeficiente de difusão, obtida sem qualquer aproximação de alta estocasticidade, e um novo efeito emergiu: a evolução angular pode induzir modos rápidos ou lentos de difusão mesmo no regime de alta estocasticidade.

Os aspectos não-Gaussianos do transporte caótico são também investigados para esses sistemas. O estudo é realizado por meio de uma relação entre a curtose, o coeficiente de difusão e o coeficiente de Burnett de quarta ordem, os quais são calculados analiticamente. Uma escala de tempo característica que delimita os regimes Gaussiano e Markoviano para a função densidade foi estabelecida.

À parte os modos acelerados, cujas propriedades cinéticas são anômalas, todo os resultados estão em excelente acordo com as simulações numéricas.

Abstract

This work consists in the study of the transport properties of chaotic Hamiltonian systems by using projection operator techniques. Such systems can exhibit deterministic diffusion and display an approach to equilibrium. We show that this diffusive behavior can be viewed as a spectral property of the associated Perron-Frobenius operator. In particular, the leading Pollicott-Ruelle resonance is calculated analytically for a general class of two-dimensional area-preserving maps. Its wavenumber dependence determines the normal transport coefficients. We calculate a general exact formula for the diffusion coefficient, derived without any high stochasticity approximation and a new effect emerges: the angular evolution can induce fast or slow modes of diffusion even in the high stochasticity regime.

The non-Gaussian aspects of the chaotic transport are also investigated for this systems. This study is done by means of a relationship between kurtosis and diffusion coefficient and fourth order Burnett coefficient, which are calculated analytically. A characteristic time scale which delimits the Markovian and Gaussian regimes for the density function was established.

Despite the accelerator modes, whose kinetics properties are anomalous, all theoretical results are in excellent agreement with the numerical simulations.

Sumário

Introdução	2
1 Regularidade e Caos Hamiltonianos	6
1.1 Equações Canônicas	6
1.2 Transformações Canônicas	9
1.3 Integrabilidade	11
1.4 Secções de Poincaré	14
1.5 Discretização	16
1.6 Dinâmica de Mapas Hamiltonianos	18
2 Caos Probabilístico	24
2.1 Passeio Aleatório	24
2.2 Equação de Liouville	26
2.3 Operador de Perron-Frobenius	28
2.4 Equação Mestra	31
2.5 Decomposição do Resolvente	34
3 Transporte em Mapas Hamiltonianos	38
3.1 Análise de Fourier	38
3.2 Ressonância de Pollicott-Ruelle	41
3.3 Difusão em Mapas Periódicos	45
3.4 Fator de Rotação Não Periódico	47
3.5 Aplicações	48
3.6 Cumulantes	54
3.7 Curtose	56
3.8 Escalas de Tempo Características	59

Conclusões e Perspectivas	69
Apêndices	71
A Transformada $\mathcal{Z}$	72
B Funções de Memória	74
C Expansões de Fase Nula	76
D Método de Balescu para $n_M = 2$	79

Introdução

É amplamente conhecido que sistemas ditos caóticos apresentam um cenário de instabilidade dinâmica que produz o chamado *efeito de sensibilidade às condições iniciais*, preconizado Poincaré em 1903¹. Em linhas gerais, a possibilidade de previsibilidade de trajetórias de certos sistemas determinísticos não-lineares é afetada uma vez que as condições presentes não podem ser estabelecidas a menos de uma certa precisão inicial ϵ_0 . Isso ocorre porque, nesses sistemas, a taxa de separação de trajetórias inicialmente muito próximas é exponencial, caracterizada pelo máximo *expoente Lyapunov* λ_{max} do sistema. O erro entre a predição e a trajetória real cresce com o tempo na forma $\epsilon_t \approx \epsilon_0 \exp(\lambda_{max} t)$. Esta relação define uma escala de tempo característica chamada tempo de Lyapunov: $t_{Lyap} \sim \lambda_{max}^{-1}$. Previsões realizadas numa escala de tempo da mesma ordem de grandeza ou superior a λ_{max}^{-1} podem somente ser descritas em termos probabilísticos. Gaspard [2] catalogou uma série de resultados relacionados à instabilidade de diversos sistemas físicos que vão desde a evolução do sistema solar à dinâmica atômico-molecular de um gás de argônio. As escalas de tempo de Lyapunov em cada caso estão reunidas na Tabela 1. Tomando como base as oscilações hidrodinâmicas, cuja escala de tempo de instabilidade é compatível com as escalas de tempo das observações cotidianas, podemos de fato notar que tanto o sistema solar quanto seus principais constituintes são estáveis somente no sentido de que suas escalas de tempo de instabilidade são muitíssimo elevadas. No extremo oposto da dinâmica celeste temos a dinâmica atômico-molecular dos gases². Devido ao número extremamente elevado de constituintes, somos natural-

¹Em 1873, trinta anos antes de Poincaré, Maxwell já notara a existência de sistemas com esse tipo de instabilidade [1].

²A própria origem da palavra *gás*, atribuída ao físico-químico flamengo Joan-Baptista van Helmont (1577-1644), tem sua raiz na palavra grega para caos $\chi\alpha\acute{o}s$ (lê-se *khaos*): em holandês, o *g* de *gas* tem pronúncia aproximadamente similar ao *ch* de *chaos*.

mente levados à descrição probabilística desses sistemas, de forma que não é surpresa constatar que $\lambda_{max}^{-1} \approx 0$.

No âmbito das descrições probabilísticas também sabemos que os sistemas caóticos, mesmo aqueles de baixa dimensionalidade, podem apresentar ao menos três tipos de comportamento “termodinâmico” que são normalmente associados a sistemas de muitos corpos: (a) as densidades de probabilidade relaxam para o equilíbrio, (b) as correlações decaem exponencialmente e (c) a dinâmica no espaço de fase torna-se difusiva. Essas três características são encontradas, por exemplo, no problema do *passeio aleatório*³, modelo que representa um paradigma no estudo dos processos estocásticos.

A proposta da presente tese é estudar as propriedades de transporte de uma classe geral de mapas Hamiltonianos bidimensionais em regime caótico. Na formulação que utilizamos, as características estocásticas que descrevemos acima podem ser obtidas por meio de propriedades de relaxação associadas ao operador de Perron-Frobenius U . As taxas de relaxação γ_m , conhecidas como *ressonâncias de Pollicott-Ruelle* [13, 14, 15, 16, 17, 18], são relacionadas aos pólos z_m dos elementos de matriz do resolvente $R(z) = (z - U)^{-1}$ na forma $z_m = e^{\gamma_m}$. Esses pólos localizam-se no interior do círculo unitário do plano complexo. Em particular, a ressonância dominante responde pelos coeficientes de transporte normais para longos tempos $n \rightarrow \infty$, compondo uma relação de dispersão com dependência do vetor de onda $\mathbf{q}$ da amplitude de Fourier da função de distribuição. Obtivemos as ressonâncias dominantes por meio da seleção de estados *relevantes* utilizando para esse fim algumas técnicas de operadores de projeção desenvolvidas por Prigogine [19, 20].

Os resultados existentes na literatura a esse respeito são rigorosos somente para sistemas hiperbólicos, que em geral são muito pouco realistas do ponto de vista da descrição de sistemas físicos. Há, no entanto, um crescente interesse na extensão desses resultados para sistemas mistos, que são em geral mais realistas, sendo que alguns resultados em aproximações de alta estocasticidade para tais sistemas têm sido confirmados recentemente [21, 22, 23, 23, 25]. Nesse contexto, acreditamos que nossa contribuição pode ser dividida em três partes: a) estender os resultados descritos acima para uma classe mais abrangente e realista de mapas Hamiltonianos que englobe, além dos sistemas hiperbólicos, também os sistemas mistos; b) romper as aproximações de alta estocasticidade ($K \gg 1$) e de pequenos comprimentos de onda ($q \ll 1/K$ ou $q \ll 1/\sqrt{K}$) que invariavelmente são assumidas na descrição probabilística de sistemas mistos⁴ e c) calcular de forma controlada

³Este problema não determinístico será revisto na seção 2.1.

⁴Na maioria dos trabalhos o *standard map* é assumido como paradigma de sistema misto.

as correções de número de onda $\mathcal{O}(q^{2l})$ no limite hidrodinâmico $q \rightarrow 0$ para as ressonâncias $\gamma(q)$ de modo a obter as expansões exatas dos coeficientes de transporte.

A relação entre as ressonâncias de Pollicott-Ruelle e as propriedades de transporte de sistemas determinísticos caóticos é tema de grande interesse e atualidade em Física Teórica, particularmente da interface de estudos de sistemas dinâmicos e mecânica estatística. Uma questão de fundamental interesse diz respeito às possíveis relações entre os expoentes de Lyapunov, que caracterizam o regime de instabilidade dinâmica dos sistemas caóticos, e tais ressonâncias, que são associadas às propriedades de transporte desses sistemas. Em 2001, Gaspard, Claus, Gilbert e Dorfman [26] demonstraram heurísticamente que, para sistemas dinâmicos com dois graus de liberdade, o coeficiente de difusão é relacionado ao maior dos expoentes de Lyapunov por meio da dimensão de Hausdorff e do número de onda q no limite hidrodinâmico. Embora seus resultados tenham sido confirmados numericamente dentro da restrição de suas hipóteses, permanece em aberto a validade ou não do caráter universal de tais resultados. Por outro lado, é crescente o interesse que tais ressonâncias vem desempenhando no estudo tanto teórico como experimental da física semi-clássica e do caos quântico. Recentemente, um experimento de espalhamento de microondas por bilhares demonstrou uma profunda conexão entre suas propriedades quânticas e a correspondente difusão clássica por meio da função de autocorrelação [27].

Divimos a tese em três partes. No Capítulo 1 optamos por uma brevíssima introdução sobre os principais aspectos que envolvem a construção e a dinâmica desses mapas. No Capítulo 2 procuramos reunir e contextualizar as principais ferramentas que utilizamos para a descrição probabilística dos mapas, com destaque para a equação mestra de Bandtlow e Coveney e para a decomposição do resolvente $R(z)$ por meio dos operadores de projeção. No Capítulo 3 empregamos essas técnicas diretamente na obtenção analítica das ressonâncias dominantes controlando rigorosamente as expansões nos números de onda q . Os resultados decorrentes desses cálculos são discutidos ao longo das seções. Cálculos e observações mais específicas são deixadas para os apêndices.

	λ_{max}^{-1} (<i>sec/digt</i>)
Sistema Solar [3]	$3.6 \cdot 10^{14}$
Plutão [4]	$1.5 \cdot 10^{15}$
Obliquidade de Marte [5]	$1 - 4 \cdot 10^{14}$
Rotação de Hyperion (satélite de Saturno) [6]	$8.5 \cdot 10^6$
Oscilações químicas caóticas [7]	880
Oscilações hidrodinâmicas caóticas [8]	5.4
$1cm^3$ de argônio à temperatura ambiente [9, 10]	10^{-10}
$1cm^3$ de argônio no ponto triplo [11, 12]	10^{-15}

Tabela 1: Escalas de tempo de estabilidade estimadas por meio de expoentes máximos de Lyapunov para alguns sistemas físicos típicos [2].

Capítulo 1

Regularidade e Caos

Hamiltonianos

1.1 Equações Canônicas

Na formulação Lagrangeana da mecânica clássica, um sistema é completamente caracterizado por uma função $L(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_n, \dot{\vec{q}}_1, \dots, \dot{\vec{q}}_n, t)$ das posições $\vec{q}_i$, das velocidades $\dot{\vec{q}}_i$ e do tempo t para todos os graus de liberdade do sistema. Em geral, L tem a forma

$$L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) = T(\dot{\vec{q}}, \vec{q}) - V(\vec{q}, t), \quad (1.1)$$

para a qual utilizamos a notação reduzida $\vec{q} \equiv (\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_n)$ e $\dot{\vec{q}} \equiv (\dot{\vec{q}}_1, \dots, \dot{\vec{q}}_n)$, sendo T a energia cinética e V a energia potencial do sistema. Em (1.1) supõe-se a independência temporal de possíveis vínculos. Tomado o *princípio de ação mínima* (ou *princípio de Hamilton*) [28]:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = 0, \quad (1.2)$$

a dinâmica do sistema é determinada pela equação

$$\partial_t \vec{\partial}_{\dot{\vec{q}}} L - \vec{\partial}_{\vec{q}} L = 0, \quad (1.3)$$

conhecida como *equação de Euler-Lagrange*¹.

¹As equações de Euler-Lagrange também podem ser obtidas por meio da segunda lei de Newton do movimento [29, 30].

A formulação Hamiltoniana é caracterizada por uma variedade de dimensão par denominada *espaço de fase*, por uma estrutura simplética sobre ela, caracterizada pelos *invariantes integrais de Poincaré-Cartan*², e por uma função sobre a mesma, denominada Hamiltoniana. Para um sistema clássico com n graus de liberdade, o espaço de fase é descrito pelas $2n$ quantidades $(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_n, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_n)$, sendo cada $\vec{p}_i$ o *momento canônico conjugado* em relação à respectiva coordenada $\vec{q}_i$, definido por

$$\vec{p} = \vec{\partial}_{\dot{q}} L. \quad (1.4)$$

Como observou Arnold [31], o formalismo Hamiltoniano possibilita estudar em maior profundidade diversos problemas da mecânica clássica que não admitiriam outro meio de solução, tais como o problema de atração gravitacional por dois centros fixos e o problema das geodésicas no elipsóide de três eixos, por exemplo. Mais importante ainda: esse formalismo é a base fundamental da teoria canônica de perturbações, da compreensão dos aspectos complexos da dinâmica caótica (teoria ergódica e mecânica estatística) e de outros campos da física matemática, seja na dinâmica de fluidos, ótica ou mecânica quântica.

A função Hamiltoniana $H(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_n, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_n, t)$ é obtida por meio de uma *transformação de Legendre* da função Lagrangeana L :

$$H(\vec{q}, \vec{p}, t) \equiv \sum_i q_i p_i - L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t), \quad (1.5)$$

na qual $\dot{\vec{q}} = \dot{\vec{q}}(\vec{q}, \vec{p}, t)$ por meio da inversão de (1.4). A dinâmica Hamiltoniana é governada por $2n$ equações diferenciais ordinárias de primeira ordem, conhecidas como *equações canônicas* (ou de Hamilton):

$$\dot{\vec{q}} = \vec{\partial}_{\vec{p}} H(\vec{q}, \vec{p}, t), \quad \dot{\vec{p}} = -\vec{\partial}_{\vec{q}} H(\vec{q}, \vec{p}, t). \quad (1.6)$$

Se a Hamiltoniana não depende explicitamente do tempo, o sistema de equações diferenciais (1.6) é dito *autônomo* e H representa a energia E do sistema:

$$H(\vec{q}, \vec{p}) = E. \quad (1.7)$$

Sistemas Hamiltonianos do tipo (1.7) são ditos *conservativos*.

²Dadas duas curvas fechadas Γ_1 e Γ_2 que envolvam um mesmo tubo de trajetórias de fase das equações de Hamilton, então as integrais de Poincaré-Cartan são preservadas ao longo dessas curvas: $\oint_{\Gamma_1} p dq - H dt = \oint_{\Gamma_2} p dq - H dt$ [31].

Considerando o conjunto ordenado das $2N$ variáveis independentes $(\vec{q}, \vec{p})$ como componentes do vetor de fase $\vec{x} = (\vec{q}, \vec{p})$, as equações de Hamilton (1.6) podem ser escritas na seguinte forma compacta

$$\dot{\vec{x}} = \mathbf{J} \vec{\partial}_x H, \quad (1.8)$$

para a qual a *matriz de simplética* $\mathbf{J}$ é definida por

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{n \times n} & \mathbf{1}_{n \times n} \\ -\mathbf{1}_{n \times n} & \mathbf{0}_{n \times n} \end{pmatrix}. \quad (1.9)$$

A matriz $\mathbf{J}$ possui as seguintes propriedades:

- $\mathbf{J}^2 = -I$;
- $\mathbf{J}$ é uma matriz ortogonal: $\mathbf{J}^{-1} = \mathbf{J}^t = -\mathbf{J}$;
- $\det \mathbf{J} = 1$.

De especial interesse são as transformações de coordenadas que preservam a forma canônica (1.8) das equações do movimento. Se escritas em novas variáveis $\vec{y} = \vec{y}(\vec{x})$, essas equações serão dadas por

$$\dot{\vec{y}} = \mathbf{D} \dot{\vec{x}}, \quad \mathbf{D} \equiv \vec{\partial}_x \vec{y} = \frac{\partial \vec{y}}{\partial \vec{x}}, \quad (1.10)$$

sendo $\mathbf{D}$ a matriz jacobiana da transformação. Introduzindo (1.8) em (1.10) temos

$$\begin{aligned} \dot{\vec{y}} = \mathbf{D} \mathbf{J} \vec{\partial}_x H &= \mathbf{D} \mathbf{J} \mathbf{D}^t \vec{\partial}_y H \\ &\equiv \mathbf{J} \vec{\partial}_y H. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Portanto, as transformações que preservam a forma estrutural de (1.8), conhecidas como *canônicas*, devem satisfazer a relação

$$\mathbf{D} \mathbf{J} \mathbf{D}^t = \mathbf{J}. \quad (1.12)$$

Uma consequência imediata de (1.12) é a conservação dos elementos de volume do espaço de fase sob transformações canônicas. Calculando o determinante de (1.12) obtém-se a condição de preservação:

$$|\det \mathbf{D}| = 1. \quad (1.13)$$

Outra característica fundamental que emerge das transformações canônicas é a preservação dos *colchetes de Poisson* aplicados a duas funções $f(\vec{q}, \vec{p}, t)$ e $g(\vec{q}, \vec{p}, t)$:

$$[f, g]_{(\vec{q}, \vec{p})} = \vec{\partial}_q f \cdot \vec{\partial}_p g - \vec{\partial}_p f \cdot \vec{\partial}_q g, \quad (1.14)$$

que também pode ser escrito de forma reduzida por meio do vetor de fase $\vec{x}$:

$$[f, g]_{\vec{x}} = (\vec{\partial}_x f)^t \mathbf{J} \vec{\partial}_x g. \quad (1.15)$$

As transformações canônicas formam então um grupo de invariância dos colchetes de Poisson:

$$\begin{aligned} [f, g]_{\vec{y}} &\equiv (\vec{\partial}_y f)^t \mathbf{J} \vec{\partial}_y g = (\mathbf{D}^t \vec{\partial}_x f)^t \mathbf{J} (\mathbf{D}^t \vec{\partial}_x g) \\ &= (\vec{\partial}_x f)^t (\mathbf{D} \mathbf{J} \mathbf{D}^t) \vec{\partial}_x g = (\vec{\partial}_x f)^t \mathbf{J} \vec{\partial}_x g \\ &= [f, g]_{\vec{x}} \end{aligned} \quad (1.16)$$

Os colchetes de Poisson gozam das seguintes propriedades algébricas:

- anti-simetria: $[f, g] = -[g, f]$;
- linearidade: $[f + \alpha g, h] = [f, h] + \alpha [g, h]$ (α constante);
- $[fg, h] = f[g, h] + [f, h]g$;
- identidade de Jacobi: $[[f, g], h] + [[g, h], f] + [[h, f], g] = 0$.

A derivada total com relação ao tempo de uma função $f(\vec{q}, \vec{p}, t)$ ao longo do fluxo Hamiltoniano pode ser escrita por meio dos colchetes de Poisson:

$$\dot{f} = [f, H] + \partial_t f, \quad (1.17)$$

sendo H a Hamiltoniana do sistema. Se f for uma constante do movimento, então $\dot{f} = \partial_t f = 0$, o que resulta na comutação de f com H :

$$[f, H] = 0. \quad (1.18)$$

1.2 Transformações Canônicas

Ao contrário das equações de Euler-Lagrange, que são invariantes por uma transformação geral de coordenadas, as equações de Hamilton são compostas por coordenadas e momentos, que formam uma estrutura simplética. Logo, a busca por transformações que preservem a forma canônica das equações de Hamilton, conhecidas por transformações canônicas, amplia a gama de transformações admissíveis que simplifiquem a resolução das equações de movimento. Considere a seguinte transformação geral de coordenadas e momentos:

$$\vec{q} \rightarrow \vec{Q}(\vec{q}, \vec{p}, t), \quad \vec{p} \rightarrow \vec{P}(\vec{q}, \vec{p}, t), \quad H(\vec{q}, \vec{p}, t) \rightarrow H'(\vec{Q}, \vec{P}, t), \quad (1.19)$$

sendo H' a Hamiltoniana nas novas variáveis, decorrente da transformação $(\vec{q}, \vec{p}) \rightarrow (\vec{Q}, \vec{P})$. Ambas as Hamiltonianas devem satisfazer ao mesmo princípio variacional:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum_i p_i \dot{q}_i - H(\vec{q}, \vec{p}, t) \right] = 0, \quad (1.20)$$

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L'(\vec{Q}, \dot{\vec{Q}}, t) dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum_i P_i \dot{Q}_i - H'(\vec{Q}, \vec{P}, t) \right] = 0. \quad (1.21)$$

Uma condição suficiente para a validade conjunta das equações (1.20) e (1.21) é que seus integrandos difiram por uma derivada total em relação ao tempo de uma função arbitrária F :

$$\sum_{i=1} p_i \dot{q}_i - H = \sum_i P_i \dot{Q}_i - H' + \frac{dF}{dt}, \quad (1.22)$$

condição que também pode ser escrita na forma diferencial:

$$\sum_i (p_i d\dot{q}_i - P_i d\dot{Q}_i) + (H' - H)dt = dF. \quad (1.23)$$

A condição (1.23), para alguma função diferenciável F , é uma definição alternativa de transformação canônica à condição (1.12).

Suponha, por exemplo, que possamos tomar o conjunto $(\vec{q}, \vec{Q})$ como coordenadas independentes. Dessa forma, a função arbitrária F pode ser escrita como função das coordenadas antigas e novas, além do tempo:

$$F = F_1(\vec{q}, \vec{Q}, t). \quad (1.24)$$

A substituição de (1.24) em (1.23) fornece o seguinte conjunto de equações:

$$\vec{p} = \vec{\partial}_q F_1, \quad \vec{P} = -\vec{\partial}_Q F_1, \quad H'(\vec{Q}, \vec{P}, t) = H(\vec{q}, \vec{p}, t) + \partial_t F_1. \quad (1.25)$$

Não sendo conveniente ou admissível uma transformação do tipo (1.24), outra possibilidade é reservada considerando-se como variáveis independentes o conjunto $(\vec{q}, \vec{P})$. Observando que

$$-\sum_i P_i dQ_i = -d \left(\sum_i P_i Q_i \right) + \sum_i Q_i dP_i, \quad (1.26)$$

e definindo $F_2(\vec{q}, \vec{P}, t)$ por meio da transformada de Legendre

$$F_2 \equiv S = \sum_i P_i Q_i + F_1, \quad (1.27)$$

a forma diferencial (1.23) implica no seguinte conjunto de equações

$$\vec{p} = \vec{\partial}_q S, \quad \vec{Q} = \vec{\partial}_P S, \quad H'(\vec{Q}, \vec{P}, t) = H(\vec{q}, \vec{p}, t) + \partial_t S. \quad (1.28)$$

Embora existam outras formas de funções geratrizes [29, 30], a geratriz S é bastante útil na formalização teórica do conceito de integrabilidade. Se um sistema mecânico é integrável, deve haver uma transformação canônica que torne a nova Hamiltoniana função apenas dos novos momentos:

$$H(\vec{q}, \vec{p}) \rightarrow H'(\vec{P}). \quad (1.29)$$

Feita tal transformação, as novas equações canônicas tornam-se trivialmente solúveis:

$$\dot{\vec{P}} = -\vec{\partial}_Q H'(\vec{P}) = 0, \quad (1.30)$$

$$\dot{\vec{Q}} = -\vec{\partial}_P H'(\vec{P}) = \vec{\omega}(\vec{c}), \quad (1.31)$$

ou seja,

$$\vec{P} \equiv \vec{c} = cte, \quad (1.32)$$

$$\vec{Q} = \vec{\omega}(\vec{c})t + \vec{Q}_0. \quad (1.33)$$

Sendo $S(\vec{q}, \vec{P})$ a função geratriz da transformação (independente do tempo), temos as relações:

$$\vec{p} = \vec{\partial}_q S(\vec{q}, \vec{c}), \quad (1.34)$$

$$\vec{Q} = \vec{\partial}_c S(\vec{q}, \vec{c}), \quad (1.35)$$

que, substituídas em (1.29), nos dão a *equação de Hamilton-Jacobi* independente do tempo

$$H(\vec{q}, \vec{\partial}_q S) = H'(\vec{c}) = cte. \quad (1.36)$$

Se a função geratriz for separável nas coordenadas

$$S(\vec{q}, \vec{c}) = \sum_i S_i(q_i, \vec{c}), \quad (1.37)$$

então a equação de Hamilton-Jacobi pode ser resolvida para S [28].

1.3 Integrabilidade

A noção de integrabilidade de um sistema dinâmico diz respeito à possibilidade de resolução analítica de suas equações do movimento. Por exemplo,

uma partícula de massa m num movimento unidimensional sob ação de um campo conservativo $V(x)$ pode ter sua equação de movimento $x(t)$ escrita explicitamente na forma

$$t - t_0 = \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{x_0}^x d\xi \frac{1}{\sqrt{E - V(\xi)}}. \quad (1.38)$$

A inversão de equações integrais do tipo (1.38) para resolução de $x(t)$ é dita resolução por meio de *quadraturas*. A quadratura é possível no sistema unidimensional acima descrito devido à existência da energia total E como integral do movimento. Alguns problemas fundamentais da mecânica clássica com número superior de graus de liberdade são também solúveis por meio de quadraturas. Podemos citar dois exemplos para três graus de liberdade:

1. O pião simétrico com um ponto fixo: as integrais do movimento, descritas pelos *ângulos de Euler* (θ, ϕ, ψ) , são os momentos p_ϕ , p_ψ e a energia total E [30].
2. O problema de Kepler: as integrais do movimento são dadas pela direção e pelo módulo do vetor momento angular $\vec{L}$ e também pela energia total E [28].

Uma característica que pode ser observada nos dois sistemas acima descritos, assim como em todos os demais sistemas Hamiltonianos integráveis por quadraturas, é o fato de que suas integrais de movimento tomadas aos pares pelos colchetes de Poisson anulam-se. Essa característica, chamada *involução*, é resultado do teorema de integrabilidade de Liouville.

Teorema de Integrabilidade de Liouville: Um sistema Hamiltoniano com n graus de liberdade é completamente integrável se existirem n integrais do movimento $F_i(\vec{q}, \vec{p})$ funcionalmente independentes e em involução:

$$[F_i, F_j] = 0. \quad (1.39)$$

Demonstração: Recordemos que uma função F é uma integral do movimento de um sistema Hamiltoniano se $[F, H] = 0$. Para demonstrar este teorema vamos supor que o conjunto de integrais do movimento $\vec{F} = \vec{c}$ seja invertível num domínio aberto do espaço de fase:

$$\vec{F}(\vec{q}, \vec{p}) = \vec{c} \quad \Rightarrow \quad \vec{p} = \vec{G}(\vec{q}, \vec{c}). \quad (1.40)$$

Por motivos óbvios, integrais funcionalmente dependentes não reduzem a dimensionalidade de um sistema. Considerando o teorema da função implícita,

podemos derivar $\vec{F}(\vec{q}, \vec{G}(\vec{q}, \vec{c}))$ em relação a cada um de seus argumentos c_i e q_i :

$$\sum_k \partial_{p_k} F_i \partial_{c_j} G_k = \delta_{ij}, \quad (1.41)$$

$$\partial_{q_j} F_i = - \sum_k \partial_{p_k} F_i \partial_{q_j} G_k. \quad (1.42)$$

A expressão (1.41) sinaliza para a condição de univocidade da inversão realizada em (1.40)

$$\det(\partial_{c_j} G_i) \neq 0. \quad (1.43)$$

O sistema Hamiltoniano será integrável se existir uma função geratriz S tal que $\vec{\partial}_q S = \vec{G}$, ou seja, $dS = \vec{G}.d\vec{q}$ deve ser uma forma diferencial exata. Portanto, $\partial_{q_i} G_j$ deve ser uma matriz simétrica. Aplicando esta condição em (1.42):

$$\begin{aligned} -\partial_{q_j} G_i &= \sum_k (\partial_{p_k} F_i)^{-1} \partial_{q_j} F_k \equiv \sum_k \partial_{q_k} F_j ((\partial_{p_k} F_i)^{-1})^t \\ &= \sum_k \partial_{q_k} F_j (\partial_{p_i} F_k)^{-1}, \end{aligned} \quad (1.44)$$

encontraremos

$$\sum_k \partial_{q_k} F_i (\partial_{p_k} F_j)^t = \sum_k \partial_{p_k} F_i (\partial_{q_k} F_j)^t. \quad (1.45)$$

O resultado (1.45) nada mais é que uma expressão geral para todos os índices $\{i, j\}$ de $[F_i, F_j] = 0$. Um sistema Hamiltoniano integrável dessa forma é dito ser *integrável no sentido de Liouville*.

As n integrais do movimento que satisfazem o teorema de Liouville limitam o fluxo Hamiltoniano a uma variedade n -dimensional $\mathcal{M}_{\vec{F}}$ do espaço de fase. O teorema de Liouville exerce uma série de conseqüências importantes sobre esta variedade:

- $\mathcal{M}_{\vec{F}}$ é uma variedade lisa invariante sob o fluxo de fase Hamiltoniano.
- Se $\mathcal{M}_{\vec{F}}$ for compacta e conexa, então $\mathcal{M}_{\vec{F}}$ é difeomorfa ao toro n -dimensional³.

³Esta importante propriedade completa a versão mais geral do teorema, conhecido como *teorema de Arnold-Liouville*. A demonstração pode ser encontrada em [31].

- Existem variáveis canônicas $(\vec{\theta}, \vec{I})$ tais que $H = H(\vec{I})$, de modo que a solução das equações de movimento nas novas variáveis será dada por

$$I_j = cte, \quad \theta_j = \omega_j t + \theta_{j0}, \quad j = 1, \dots, n, \quad (1.46)$$

para as quais $\omega_j = \partial_{I_j} H$.

- As equações canônicas são integráveis por quadraturas.

A terceira propriedade pode ser verificada substituindo (1.42) nos colchetes de Poisson (1.45):

$$- \sum_{k,l} (\partial_{p_l} F_i) (\partial_{q_k} G_l) (\partial_{p_k} F_j) + \sum_{k,l} (\partial_{p_k} F_i) (\partial_{q_k} G_l) (\partial_{p_l} F_j) = 0. \quad (1.47)$$

Uma vez que os índices k e l em (1.47) são mudos, podemos efetuar a troca $k \leftrightarrow l$ no segundo somatório de (1.47) e obter

$$\sum_{k,l} (\partial_{p_l} F_i) (\partial_{q_k} G_l - \partial_{q_l} G_k) (\partial_{p_k} F_j) = 0. \quad (1.48)$$

Satisfeita a condição de univocidade (1.43) sobre (1.48) voltamos, portanto, à condição de simetria do campos $\partial_{p_j} G_i$:

$$\partial_{q_k} G_l = \partial_{q_l} G_k, \quad (1.49)$$

donde conclui-se a existência de uma função geratriz $S(\vec{q}, \vec{I})$ que rege a transformação canônica $(\vec{q}, \vec{p}) \rightarrow (\vec{\theta}, \vec{I})$ tal que $\vec{G} = \vec{\partial}_q S$. Portanto

$$\vec{\theta} = \vec{\partial}_I S, \quad \vec{p} = \vec{\partial}_q S. \quad (1.50)$$

1.4 Secções de Poincaré

Considere um sistema Hamiltoniano autônomo de dois graus de liberdade. Se este sistema for integrável, sua Hamiltoniana H pode ser escrita nas variáveis ação-ângulo $(I_1, I_2, \theta_1, \theta_2)$ na forma

$$H(I_1, I_2) = E. \quad (1.51)$$

Sendo a energia E a primeira integral do movimento do sistema, a dimensionalidade da dinâmica no espaço de fase é reduzida de quatro para três. Segundo o teorema de Liouville, a existência de uma segunda integral confina

a dinâmica ao toro bidimensional. Sobre o toro o movimento angular pode ser parametrizado pelas frequências associadas a cada grau de liberdade:

$$\theta_1 = \omega_1 t + \theta_{10}, \quad \theta_2 = \omega_2 t + \theta_{20}, \quad (1.52)$$

sendo que as frequências angulares possuem a seguinte dependência funcional das variáveis de ação: $\omega_{1,2} = \omega_{1,2}(I_1, I_2)$. A dinâmica sobre o toro pode ser descrita assumindo-se que um dos pares de variáveis ação-ângulo, digamos (I_1, θ_1) , descreve uma secção reta do toro, sendo I_1 o raio da secção e θ_1 o ângulo que descreve seu arco. O par restante (I_2, θ_2) descreve o anel formado pelo toro. Define-se então a *secção de Poincaré* sobre o toro como sendo o conjunto de intersecções do fluxo Hamiltoniano com a secção (I_1, θ_1) realizadas a cada volta completa do fluxo ao redor do anel, que se dá ao tempo $2\pi/\omega_2$. Fixada a energia E , por meio de (1.51) podemos escrever $I_2 = I_2(E, I_1)$. Dessa forma, a evolução discreta do fluxo Hamiltoniano sobre a secção pode ser descrita por meio do seguinte mapa

$$\begin{aligned} I_{n+1} &= I_n, \\ \theta_{n+1} &= \theta_n + \alpha(I_{n+1}), \end{aligned} \quad (1.53)$$

para o qual $\alpha(I) = 2\pi\omega_1/\omega_2$ é chamado *fator de rotação* e o índice n define a evolução temporal do fluxo a cada intersecção. O sistema (1.53) é definido na literatura como mapa *twist* [32].

Para frequências angulares *comensuráveis*, ou seja, $\omega_1/\omega_2 = r/s$ com r e s primos entre si, o fluxo retorna ao seu valor inicial a cada s iterações resultando num ponto fixo de período s para (1.53). A secção circular é então marcada sempre no mesmo conjunto de s pontos. No caso das frequências *incomensuráveis* (ω_1/ω_2 irracional) o fluxo Hamiltoniano cobre o toro densamente resultando numa secção circular preenchida no limite $n \rightarrow \infty$. Essas características do fluxo sobre a secção são freqüentemente utilizadas como forte indício numérico de integrabilidade de sistemas com dois ou mais graus de liberdade. A comensurabilidade das frequências angulares também desempenha papel fundamental na teoria de perturbações de sistemas integráveis [32].

Podemos considerar agora a perturbação do sistema integrável (1.51) por meio da adição de um termo de interação que também é função periódica das variáveis ângulo (θ_1, θ_2) :

$$H = H_0(I_1, I_2) + \epsilon H_1(I_1, I_2, \theta_1, \theta_2), \quad (1.54)$$

sendo ϵ o parâmetro de perturbação. O mapa twist (1.53) será modificado para a forma geral

$$\begin{aligned} I_{n+1} &= I_n + \epsilon f(I_{n+1}, \theta_n), \\ \theta_{n+1} &= \theta_n + \alpha(I_{n+1}) + \epsilon g(I_{n+1}, \theta_n), \end{aligned} \quad (1.55)$$

conhecida como mapa *twist* perturbado, para o qual f e g são funções periódicas em θ [32]. A dependência de f e g em função da variável de ação I ao instante $n + 1$ ao invés do instante n é escolhida apenas para que a propriedade de preservação de área

$$\det \frac{\partial(I_{n+1}, \theta_{n+1})}{\partial(I_n, \theta_n)} = 1, \quad (1.56)$$

tenha uma forma mais simples:

$$\partial_I f(I, \theta) = -\partial_\theta g(I, \theta), \quad (1.57)$$

embora o próprio sistema (1.55) defina I_{n+1} implicitamente em termos de I_n . Mapas com I_{n+1} e θ_{n+1} dados explicitamente em termos de I_n e θ_n podem ser escritos utilizando-se técnicas de transformação de Lie [33].

Em muitos casos de interesse físico f é independente de I , resultando no chamado mapa *twist* radial [32]:

$$\begin{aligned} I_{n+1} &= I_n + \epsilon f(\theta_n), \\ \theta_{n+1} &= \theta_n + \alpha(I_{n+1}), \end{aligned} \quad (1.58)$$

para o qual $g(I, \theta) = 0$ devido a (1.57). O caso particular mais estudado de (1.58) é o *standard map* (ou mapa de Chirikov-Taylor) definido como

$$\begin{aligned} I_{n+1} &= I_n + \epsilon \sin \theta_n, \\ \theta_{n+1} &= \theta_n + I_{n+1}, \end{aligned} \quad (1.59)$$

que foi utilizado por Chirikov [34] e Greene [35] para estudo da transição entre a dinâmica regular e caótica por meio do parâmetro ϵ .

1.5 Discretização

O estudo do fluxo Hamiltoniano contínuo por meio de secções de Poincaré implica necessariamente num processo de discretização temporal dessa dinâmica. Essa discretização pode ser construída de forma numérica ou, em certos casos, de forma analítica. Um dos exemplos mais ilustrativos de discretização analítica de sistemas Hamiltonianos é a obtenção de mapas simpléticos para sistemas regulares influeciados por perturbações temporalmente periódicas de espectro amplo [34, 36, 37, 59]. A perturbação H_1 da Hamiltoniana para esse tipo de influência pode ser escrita na forma

$$H_1(I, \theta, t) = \sum_m \sum_{n=-M}^M H_{mn}(I) \cos(m\theta - n\Omega t + \chi_{mn}), \quad (1.60)$$

para qual a expansão é realizada num número muito grande $m \gg 1$ mas finito de harmônicos. Numa segunda hipótese, supõe-se que as amplitudes H_{mn} dependam muito fracamente do índice n , de forma que podemos omitir esse índice e reconsiderar (1.60) como

$$H_1(I, \theta, t) \approx H_s(I, \theta) \sum_{n=-M}^M \sin(n\Omega t) + H_c(I, \theta) \sum_{n=-M}^M \cos(n\Omega t), \quad (1.61)$$

sendo as novas amplitudes H_s e H_c dadas por

$$H_s = \sum_m H_m(I) \sin(m\theta + \chi_m), \quad (1.62)$$

$$H_c = \sum_m H_m(I) \cos(m\theta + \chi_m). \quad (1.63)$$

Extendendo a soma sobre n para $M \rightarrow \infty$, podemos utilizar as fórmulas de soma de Poisson [40]

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \cos(2\pi nx) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - n), \quad (1.64)$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \sin(2\pi nx) = 0, \quad (1.65)$$

e reescrever H_1 como uma soma de funções deltas de Dirac:

$$H_1(I, \theta, t) = \frac{2\pi}{\Omega} H_c(I, \theta) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(t - \frac{2\pi}{\Omega} n\right). \quad (1.66)$$

As novas equações do movimento devido à perturbação H_1 serão dadas por

$$\frac{dI}{dt} = \epsilon f(I, \theta) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(t - \frac{2\pi}{\Omega} n\right), \quad (1.67)$$

$$\frac{d\theta}{dt} = \omega(I) + \epsilon g(I, \theta) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(t - \frac{2\pi}{\Omega} n\right), \quad (1.68)$$

nas quais as funções f e g

$$f(I, \theta) = -\frac{\partial S(I, \theta)}{\partial \theta}, \quad g(I, \theta) = \frac{\partial S(I, \theta)}{\partial I}, \quad (1.69)$$

são definidas pela função geratriz $S(I, \theta)$

$$S(I, \theta) = \frac{2\pi}{\Omega} H_c = \frac{2\pi}{\Omega} \sum_m H_m(I) \cos(m\theta + \chi_m). \quad (1.70)$$

A justificativa intuitiva para a substituição da perturbação pela série de funções delta é baseada em [36, 37]: se os termos de alta frequência não contribuem significativamente para a perturbação, então adicioná-los não afetaria a dinâmica significativamente.

Integrando as equações (1.67) e (1.68) ao longo de um período entre os instantes $t_n - 0$ e $t_n - 0 + T$ obtém-se

$$\begin{aligned} I_{n+1} &= I_n + \epsilon \int_{t_n-0}^{t_n+0} f(I, \theta) \delta(t - nT) dt \\ &= I_n + \epsilon f(I_n, \theta_n), \end{aligned} \quad (1.71)$$

$$\begin{aligned} \theta_{n+1} &= \theta_n + \omega(I_{n+1})T + \epsilon \int_{t_n-0}^{t_n+0} g(I, \theta) \delta(t - nT) dt \\ &= \theta_n + \omega(I_{n+1})T + \epsilon g(I_n, \theta_n), \end{aligned} \quad (1.72)$$

ou seja, um mapa de estrutura semelhante ao prescrito em (1.55) para o qual a condição de preservação de área (1.57) está incluída nas restrições (1.69) para a função geratriz.

O *standard map* (1.59) é quase sempre assumido como decorrente da Hamiltoniana do *kicked rotor*:

$$\begin{aligned} H(I, \theta, t) &= \frac{I^2}{2} + \epsilon \lim_{M \rightarrow \infty} \sum_{n=-M}^M \cos(\theta - 2\pi n t) \\ &= \frac{I^2}{2} + \epsilon \cos \theta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - n), \end{aligned} \quad (1.73)$$

para o qual a Hamiltoniana de perturbação é um caso particular de (1.60), sendo suas funções geratriz e de perturbação dadas por

$$S(I, \theta) = \epsilon \cos \theta, \quad f(I, \theta) = \sin \theta, \quad g(I, \theta) = 0. \quad (1.74)$$

Na comparação com (1.60), os modos são restringidos em $m = 1$, enquanto que o número de harmônicos é estendido para $M \rightarrow \infty$, sendo $\Omega = 2\pi$ e $\chi_{1n} = 0$. Existem diversos métodos de discretização de sistemas Hamiltonianos que resultam em variantes de (1.55). Um estudo mais detalhado deste tópico pode ser encontrado nas referências [41, 42].

1.6 Dinâmica de Mapas Hamiltonianos

Na presente tese, estudamos as propriedades de transporte da seguinte classe geral de mapas Hamiltonianos bidimensionais:

$$\begin{aligned} I_{n+1} &= I_n + K f(\theta_n), \\ \theta_{n+1} &= \theta_n + c \alpha(I_{n+1}) \mod 2\pi, \end{aligned} \quad (1.75)$$

As variáveis (I, θ) são definidas sobre o cilindro:

$$-\pi \leq \theta < \pi, \quad -\infty < I < \infty. \quad (1.76)$$

Em (1.75) $f(\theta)$ representa a função impulso na variável de ação I . O fator de rotação $\alpha(I)$ é inicialmente assumido aqui como uma função periódica⁴:

$$\alpha(I) = \alpha(I + 2\pi r), \quad (1.77)$$

para o qual c e r são parâmetros reais e K é o *parâmetro de estocasticidade*. Em princípio, o fator de rotação é definido como uma função periódica de I , embora os casos não periódicos possam ser considerados no limite $r \rightarrow \infty$.

O casos mais estudados na literatura são os de mapas do tipo (1.75) com fator de rotação linear:

$$c \alpha(I) \equiv I, \quad (1.78)$$

que também são periódicos na variável de ação uma vez que I pode ser tomado como $I \bmod 2\pi$ em (1.75). Para tais mapas, consideráveis desenvolvimentos teóricos foram realizados no estudo da difusão determinística em regime caótico [43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53], com especial ênfase no estudo do *standard map*:

$$\begin{aligned} I_{n+1} &= I_n + K \sin(\theta_n), \\ \theta_{n+1} &= \theta_n + I_{n+1} \quad \bmod 2\pi, \end{aligned} \quad (1.79)$$

já mencionado na seção anterior com parâmetro de estocasticidade ϵ . No entanto, a maioria dos sistemas físicos mais realistas são melhor descritos justamente pelos casos em que o fator de rotação é não linear. Exemplos gerais de aplicações podem ser encontrados nas referências [32, 41]. Aplicações mais específicas vão desde a mecânica celeste [54, 55, 56], física de plasmas e de fluidos [57, 58, 59, 60], passando por astrofísica e mecanismos de aceleração [61, 62, 63, 64]. As propriedades de transporte de tais mapas nunca foram adequadamente estudadas⁵, motivo que em grande parte inspirou o tema da presente tese.

Vamos introduzir aqui uma classificação resumida dos diversos tipos de órbitas que em geral ocorrem em mapas do tipo (1.75):

- *Ciclos*: Correspondem às órbitas periódicas de período p . São órbitas que, ao partir de uma certa condição inicial $\mathcal{X}_0$, retornam à mesma posição depois de p iterações. O conjunto de pontos formado pelo ciclo

$$\{\mathcal{X}_0, \mathcal{X}_1, \dots, \mathcal{X}_{p-1}, \mathcal{X}_p = \mathcal{X}_0\} \quad (1.80)$$

⁴Analísaremos mapas não periódicos nas seções 3.4 e 3.5 considerando o limite $r \rightarrow \infty$

⁵Discutiremos esse aspecto detalhadamente na Seção 3.

satisfaz à equação periódica

$$\mathcal{X}_{n+p} = \mathcal{X}_n. \quad (1.81)$$

- *Curvas KAM*: Ao contrário de uma órbita periódica, uma condição inicial lançada numa órbita *KAM* jamais retorna à mesma posição, embora seus pontos subsequêntes cubram densamente alguma curva Γ . Mais formalmente, para cada ponto $\mathcal{Y} \in \Gamma$, encontra-se uma subsequência $\mathcal{X}_{n_s}$ de $\mathcal{X}_n$ tal que

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \mathcal{X}_{n_s} = \mathcal{Y} \in \Gamma. \quad (1.82)$$

As curvas *KAM* podem ser subdividas em duas classes: (a) *cadeias de ilhas*, que são aglomerados de curvas fechadas que englobam, cada uma, cada um dos q pontos de um ciclo. Cadeias secundárias de ilhas são formadas ao redor da cadeia primária, cadeias terciárias forma-se ao redor das secundárias e assim por diante, formando uma estrutura auto-similar. (b) *barreiras KAM*, que são camadas densas que atuam como barreiras que impedem a circulação global de trajetórias no espaço de fase.

- *Órbitas Caóticas*: As seqüências de pontos geradas por órbitas caóticas nunca se repetem, mas seus sucessivos pontos cobrem densamente alguma região bidimensional $\mathcal{S}$ do espaço de fase.

Na situação em que $K = 0$, o mapa (1.75) é regular:

$$I_{n+1} = I_n, \quad \theta_{n+1} = \theta_n + c \alpha(I_{n+1}) \mod 2\pi \quad (1.83)$$

e qualquer condição inicial (I_0, θ_0) tem sua órbita trivialmente solucionada:

$$I_n = I_0, \quad \theta_n = \theta_0 + n c \alpha(I_0) \mod 2\pi. \quad (1.84)$$

Vamos introduzir agora um importante conceito relacionado tanto aos ciclos quanto às curvas *KAM*. Para uma órbita que parte de uma condição inicial (I_0, θ_0) , defini-se o *número de rotação* $w(I_0)$ como sendo

$$w(I_0) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\theta_n - \theta_0}{n} \quad (1.85)$$

Ainda na situação $K = 0$ o número de rotação é facilmente calculável:

$$w(I_0) = c \alpha(I_0). \quad (1.86)$$

Se a condição inicial I_0 for tal que torne $w(I_0)$ uma fração irredutível de 2π :

$$w(I_0) = 2\pi \frac{p}{q}, \quad (1.87)$$

então a trajetória compõe um ciclo, que sempre retorna à origem depois de q iterações:

$$\begin{aligned} I_{n+q} &= I_n, \\ \theta_{n+q} &= \theta_n + 2\pi q \frac{p}{q} = \theta_n + 2\pi p = \theta_n \pmod{2\pi}. \end{aligned} \quad (1.88)$$

Na situação oposta, quando $w(I_0)$ é um número irracional, a trajetória nunca retorna à posição inicial embora cubra densamente o círculo de raio I_0 formando uma barreira *KAM*.

Considere agora uma perturbação do cenário anteriormente descrito por meio da introdução de um pequeno valor não nulo do parâmetro de estocasticidade K . Agora não podemos mais tomar o número de rotação $w(I_0)$ exatamente por $c\alpha(I_0)$, o que significa alguma alteração na racionalidade p/q dos ciclos regulares originais. Portanto, devemos nos perguntar sobre o que acontece àqueles ciclos de período q . A resposta encontra-se no *teorema de Poincaré-Birkhoff* [65], que afirma a existência de um número par $2mq$ de pontos fixos após a perturbação. Pelo que sabemos atualmente, nada se pode afirmar sobre o número m , embora seja sabido que os $2mq$ pontos fixos dividem-se igualmente, e alternadamente, entre pontos fixos elípticos (centros) e hiperbólicos (selas). As trajetórias que se aproximam dos centros tendem a circundá-los, enquanto que as trajetórias que se aproximam das selas tendem a fazê-lo pela direção de estabilidade ao mesmo passo em que se afastam da mesma pela direção de instabilidade.

Enquanto K cresce de valor, mas ainda mantendo-se suficientemente pequeno, o cenário de bifurcação de ciclos em centros e selas é uma característica geral do sistema. Em contrapartida, as barreiras *KAM* vão mudando seu aspecto: essas curvas contínuas passam a desenvolver lacunas que as transformam em estruturas “esponjosas” fractais, análogas aos conjuntos de Cantor. As lacunas criadas passam a servir como possíveis janelas de fuga para as trajetórias instáveis, transformando antigas barreiras *KAM* em camadas agora permeáveis, ampliando a região de caoticidade no espaço de fase. Tais estruturas são denominadas *cantors*.

O crescimento continuado de K faz com que as lacunas cresçam até que as antigas barreiras *KAM* - agora cantors - sejam completamente destruídos. No entanto, as diversas barreiras *KAM* não são destruídas sob os mesmos valores de K : certas barreiras são mais robustas que outras. O confinamento *KAM* só é totalmente quebrado quando atingimos um certo valor

crítico K_c para o qual a última barreira *KAM* é destruída. Após ultrapassado esse limite, o movimento caótico estende-se por quase todo o espaço de fase, situação à qual denomina-se *caos global*. Passado esse estágio, entretanto, ainda existirão regiões isoladas formadas por ilhas que permanecerão localmente inacessíveis às trajetórias caóticas. No entanto, essas regiões vão diminuindo de tamanho à medida de K cresce, tornando o espaço de fase cada vez mais ocupado pelas órbitas caóticas.

Retornando à situação de pré-caos global, quando K ainda se aproxima de K_c , devemos nos perguntar sobre qual das barreiras *KAM* é a mais robusta, sobre qual a condição que a caracteriza e sobre qual o valor crítico K_c do parâmetro de estocasticidade associado. Tal questão foi resolvida por Greene [35] no caso do *standard map* utilizando argumentos teóricos de renormalização e numéricos, sendo o valor do parâmetro crítico encontrado $K_c \approx 0,9716$. A robustez das barreiras *KAM* é definida pelo *grau de irracionalidade* do número de rotação: números racionais são mais suscetíveis às perturbações que os irracionais e, dentre os irracionais, existem aqueles que são mais (ou menos) “parecidos” com os racionais. A *medida de irracionalidade* de um número x positivo é dada pela sua representação por meio de *frações contínuas* [66]:

$$x = x_0 + \frac{1}{x_1 + \frac{1}{x_2 + \frac{1}{x_3 + \dots}}} \quad (1.89)$$

que, em notação simplificada, tem a representação $x = [x_0, x_1, x_2, x_3, \dots]$, sendo que todos os números x_i são inteiros não negativos. Um número racional é sempre representável por uma cadeia finita de termos não nulos, enquanto que um número irracional é representável por uma cadeia infinita desses termos. Os números irracionais podem ser então aproximados por números racionais por meio de truncamento da cadeia. A série (1.89) converge rapidamente à medida que os termos x_i crescem. Quanto mais rápida é a convergência, menor o grau de irracionalidade do número. Dessa forma, o mais irracional dos números (descontada sua parte inteira x_0), deve ser representado pela série $w_c = [0, 1, 1, 1, \dots]$, que sabemos ser o inverso da famosa *razão áurea* g_* :

$$w_c = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} = \frac{1}{g_*} = g_* - 1 = 0,618034 \dots \quad (1.90)$$

Em suma Greene mostrou, com base no estudo do *standard map*, que a barreira *KAM* mais robusta tem número de rotação dado pelo inverso da razão áurea, e que ela somente é rompida quando se atinge um valor crítico K_c para o parâmetro de estocasticidade.

- Nota: Mapas Hamiltonianos periódicos podem exibir trajetórias *balísticas* para certas condições iniciais que são regulares e estáveis sob determinadas condições de parâmetros. Considere, por exemplo, o *standard map* (1.79). Para as condições iniciais

$$I_{1l} = 2\pi m, \quad K \sin(\theta_{1l}) = 2\pi l, \quad (1.91)$$

sendo l e m inteiros, a ação I cresce regularmente por um fator de $2\pi l$ a cada iteração. Essas trajetórias, conhecidas como *modos acelerados*, são estáveis sob a condição

$$|2 \pm K \cos(\theta_{1l})| < 2. \quad (1.92)$$

Para $|\sin(\theta_{1l})| \sim 1$ temos modos acelerados estáveis para $K \sim 2\pi l$, cujas bacias de atração diminuem com o aumento de K [32]. Trajetórias que se avizinham desses modos acelerados tendem a ser dragadas pelos mesmos por um certo tempo causando acentuados picos no coeficiente de difusão, como veremos na Capítulo 3.

Capítulo 2

Caos Probabilístico

2.1 Passeio Aleatório

O famoso problema do passeio aleatório, conhecido na literatura como *random walk*, é bastante ilustrativo para se compreender o processo de difusão e relaxação que ocorre em sistemas caóticos determinísticos. Neste problema imaginamos o movimento aleatório de uma partícula-teste que, partindo da origem $X_0 = 0$, desloca-se unidimensionalmente para a direita com probabilidade p ou para esquerda, com probabilidade $q = 1 - p$. O tamanho do passo é o mesmo para ambos os sentidos de forma que, a cada instante n , uma variável aleatória X_n assume os valores $+1$ ou -1 para um salto à direita ou à esquerda, respectivamente. A variável de posição da partícula S_n será $S_n = X_1 + \dots + X_n$, enquanto que o processo estocástico é regido por uma distribuição binomial sobre a probabilidade $\rho_{k,n} = P\{S_n = k\}$.

O passeio aleatório pode ser descrito numa versão contínua introduzindo-se as variáveis r e δ tais que a n -ésima parada da partícula ocorra na posição $S_n\delta = k\delta$ ao tempo n/r de tal forma que, nos limites assintóticos $k \rightarrow \infty$ e $n \rightarrow \infty$, tenhamos $k\delta \rightarrow x$ e $n/r \rightarrow t$ para $r \rightarrow \infty$ e $\delta \rightarrow 0$. A probabilidade $\rho_{k,n}$ que antes satisfazia a equação de diferenças

$$\rho_{k,n+1} = p \rho_{k-1,n} + q \rho_{k+1,n} \quad (2.1)$$

assume agora a seguinte versão contínua na forma de densidade $\rho(t, x)$:

$$\rho(t + r^{-1}, x) = p \rho(t, x - \delta) + q \rho(t, x + \delta). \quad (2.2)$$

Podemos escolher o passeio aleatório simétrico $p = q = 1/2$ para estudo. Expandindo a expressão (2.2) em série nos parâmetros r^{-1} e δ até primeira e segunda ordem, respectivamente, obtém-se a equação de difusão para esta versão passeio aleatório:

$$\partial_t \rho(t, x) = D \partial_x^2 \rho(t, x), \quad (2.3)$$

sendo $D = \delta^2/2r^{-1}$ é o coeficiente de difusão.

Vamos assumir que a partícula seja mantida confinada num intervalo de comprimento L : $-L/2 < x < L/2$. Neste caso, a densidade $\rho(t, x)$ nas paredes deve satisfazer a seguinte condição de contorno:

$$\partial_x \rho(t, x)|_{x=\pm L/2} = 0. \quad (2.4)$$

Este problema é similar ao problema quântico da partícula confinada num poço unidimensional infinito com o fator $i\hbar$ multiplicando o lado esquerdo de (2.3). Dessa forma, a densidade pode ser expandida como

$$\rho(t, x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k e^{\gamma_k t} \phi_k(x), \quad (2.5)$$

para a qual

$$\phi_k(x) = \begin{cases} \sqrt{2/L} [\cos(\pi k x/L) + (\sqrt{1/2} - 1) \delta_{k,0}] & k \text{ par}, \\ \sqrt{2/L} \sin(\pi k x/L) & k \text{ ímpar}, \end{cases} \quad (2.6)$$

forma uma base ortonormal e

$$\gamma_k = - \left(\frac{\pi k}{L} \right)^2 D, \quad (2.7)$$

representa as taxas de relaxação do sistema para cada modo k . Os coeficientes a_k são determinados pela densidade de probabilidades inicial $\rho(t = 0, x)$ previamente definida:

$$a_k = \int_{-L/2}^{L/2} dx \rho(t = 0, x) \phi_k(x). \quad (2.8)$$

O estado de equilíbrio é atingido na forma

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \rho(t, x) = a_0 L^{-1/2}, \quad (2.9)$$

através da seguinte evolução assintótica

$$\rho(t, x) - a_0 L^{-1/2} \sim a_1 e^{-\gamma_1 t} \phi_1(x), \quad (2.10)$$

com taxa de relaxação dominante $\gamma_1 = -\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 D$. A correlação densidade-densidade será

$$\begin{aligned} C(t) &= \int_{-L/2}^{L/2} dx \rho(t, x) \rho(0, x) - a_0^2 \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} |a_k|^2 e^{-\gamma_k t} \sim |a_1|^2 e^{-\gamma_1 t}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

As características gerais acima descritas para o passeio aleatório também estão presentes nos sistemas caóticos determinísticos que exibem relaxação exponencial: processos difusivos com relaxação exponencial dominante caracterizada pelo expoente $\gamma(q) = -q^2 D$, sendo q (no caso, π/L) o número de onda associado e D o coeficiente de difusão - que independe da distribuição inicial de probabilidades escolhida. Nos sistemas caóticos determinísticos a difusividade ocorre somente para trajetórias ilimitadas. Em analogia ao passeio aleatório, a quebra do confinamento pode ser obtida por meio do limite $L \rightarrow \infty$, que corresponde ao chamado *limite hidrodinâmico* $q \rightarrow 0$ do número de onda.

2.2 Equação de Liouville

Na formulação estatística um ponto do espaço de fase de um determinado sistema é chamado *ponto representativo* e representa um *microestado* desse sistema. Um sistema sob determinadas condições macroscópicas, o qual chamamos *macroestado*, é uma composição de um vasto número de microestados. Já uma coleção imaginária de sistemas idênticos em composição e situação macroscópica onde cada um é formado por combinação distinta de microestados denomina-se um *ensemble* [30]. Nas descrições probabilísticas é natural que alguns microestados podem ser mais prováveis que outros. Portanto, um ensemble deverá ser descrito por uma densidade $\rho(\vec{q}, \vec{p}, t)$ de pontos representativos no espaço de fase que caracterize a distribuição dos diferentes microestados num dado instante. Mais especificamente

$$\rho(\vec{q}, \vec{p}, t) d\vec{q} d\vec{p} \quad (2.12)$$

é o número de pontos representativos que estão localizados no elemento de volume $d\vec{q} d\vec{p}$ do espaço de fase centrados no ponto $\vec{x} = (\vec{q}, \vec{p})$ num dado instante t . O número de pontos representativos contidos no elemento de volume é preservado pelo *teorema de unicidade* [67] sobre as equações canônicas: cada ponto $\vec{x}$ no instante t é resultado da evolução dinâmica de um único

ponto $\vec{x}_0$ dado num instante anterior t_0 . Uma vez que o elemento de volume também é conservado ao longo da evolução temporal Hamiltoniana (teorema de Liouville), a equação diferencial para a densidade ρ será

$$\dot{\rho} = \partial_t \rho + [\rho, H]_{\vec{x}} = 0, \quad (2.13)$$

sendo $[\cdot, \cdot]_{\vec{x}}$ o colchete de Poisson (1.15). A equação (2.13) é tradicionalmente conhecida como *equação de Liouville*.

Um ensemble é dito estacionário quando a densidade não depende explicitamente do tempo:

$$\partial_t \rho = -[\rho, H]_{\vec{x}} = 0. \quad (2.14)$$

Neste caso, os valores esperados de quaisquer grandezas físicas associadas ao sistema não dependem do tempo, donde conclui-se que um ensemble estacionário representa um sistema em equilíbrio. Uma vez que a densidade ρ comute com a Hamiltoniana H , esta pode ser tomada como uma integral do movimento.

Voltemos ao estudo das situações de não-equilíbrio. Uma vez estabelecidas as condições iniciais e de contorno no espaço de fase para a equação de Liouville, o estado estatístico do sistema fica estabelecido para todo tempo contínuo t . Devido ao fato de ser a equação de Liouville uma equação linear, sua solução pode ser descrita na forma operacional

$$\rho(t) = e^{Lt} \rho(0), \quad L(\cdot) \equiv -[\cdot, H]_{\vec{x}} \quad (2.15)$$

desde que a Hamiltoniana H não dependa explicitamente do tempo¹. Uma maneira alternativa de se obter a solução da equação de Liouville é escrevê-la por meio de uma transformada de Laplace

$$\rho(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma} dz e^{-izt} R(z) \rho(0) \quad (2.16)$$

sendo o contorno Γ uma linha reta paralela ao eixo real localizada sobre todas as singularidades do resolvente $R(z)$, que é definido por [68]:

$$R(z) = \frac{1}{-iz - L}. \quad (2.17)$$

Os operadores L e $R(z)$ podem ser representados em forma matricial depois de escolhida uma base apropriada. Os autovalores de $R(z)$ definem um espectro que determina o tipo de dependência temporal da densidade ρ .

Introduziremos agora a maneira pela qual os conceitos de evolução temporal acima descritos para a função densidade podem ser adaptados aos sistemas

¹Do contrário, a solução deve ser descrita por uma série de Dyson.

de evolução temporal discreta, mais especificamente, às densidades relativas a mapas Hamiltonianos. Neste caso, a evolução do estado estatístico de um sistema é definida por uma seqüência equidistante de instantes de tempo que podem, sem qualquer perda de generalidade, ser escalonados como uma seqüência de números inteiros: $t = 0, 1, 2, \dots, n, \dots$. A formulação diferencial estabelecida pela equação de Liouville perde aplicabilidade, restando-nos como guia a formulação operacional sinalizada por (2.15), que pode ser escrita como

$$\rho_n = U^n \rho_0, \quad (2.18)$$

para a qual n denota o tempo discreto e a troca $e^L \rightarrow U$ define o *operador de Perron-Frobenius* associado ao mapa. A transformada de Laplace é trocada pela transformada $\mathcal{Z}$:

$$\rho_n = \frac{1}{2\pi i} \oint_C dz R(z) z^n \rho_0, \quad (2.19)$$

sendo que o resolvente é agora definido por $R(z) = (z - U)^{-1}$, enquanto que o contorno C é definido como sendo uma curva fechada externa ao círculo unitário centrado na origem do plano complexo. As singularidades de $R(z)$ estão localizadas dentro ou sobre o contorno C e também definem a dependência temporal da densidade ρ_n . Esses aspectos da evolução temporal serão discutidos nas próximas secções.

2.3 Operador de Perron-Frobenius

Como vimos no Capítulo 1, a descrição determinística de sistemas dinâmicos de evolução temporal discreta baseia-se nas sucessivas iterações, a partir de uma condição inicial $\vec{x}_0$, de um mapa do tipo

$$\vec{x}_{n+1} = \vec{f}(\vec{x}_n). \quad (2.20)$$

Se o mapa (2.20) é Hamiltoniano, então deve satisfazer à condição de preservação de volume:

$$\det \mathbf{D}(\vec{x}) = 1, \quad \mathbf{D}(\vec{x}) \equiv \vec{\partial}_x \vec{f}(\vec{x}). \quad (2.21)$$

Na abordagem probabilística, a evolução temporal de ensembles de trajetórias é descrita por uma densidade de probabilidade $\rho_n(\vec{x})$, cuja evolução temporal deve ser guiada pelo mapa (2.20):

$$\rho_{n+1}(\vec{x}) = U \rho_n(\vec{x}) = \int d\vec{y} \delta(\vec{x} - \vec{f}(\vec{y})) \rho_n(\vec{y}), \quad (2.22)$$

sendo U o operador de Perron-Frobenius. O *kernel* $\delta(\vec{x} - \vec{f}(\vec{y}))$ pode ser considerado como a densidade de probabilidade condicional para que uma trajetória seja localizada no ponto $\vec{x}$ ao tempo $n + 1$ partindo inicialmente do ponto $\vec{y}$ ao instante n . Essa densidade condicional é dada por uma distribuição de Dirac devido ao caráter determinístico da evolução. A operação de Perron-Frobenius pode ser integrada explicitamente:

$$\begin{aligned} U\rho_n(\vec{x}) &= \sum_{\vec{y}=\vec{f}^{-1}(\vec{x})} \frac{\rho_n(\vec{y})}{|\det \mathbf{D}(\vec{y})|} \\ &= \rho_n(\vec{f}^{-1}(\vec{x})), \end{aligned} \quad (2.23)$$

na qual a condição de preservação de volume (2.21) foi considerada. Ainda que possamos escrever $\rho_n(\vec{x}) = \rho_0(\vec{f}^{-n}(\vec{x}))$ a forma explícita (2.23) é, em geral, de pouca utilidade para se avaliar a evolução de densidades para longos tempos. A alternativa é buscar métodos para os quais a irregularidade encontrada no estudo de trajetórias individuais num regime caótico seja compensada, em contrapartida, pela regularidade que a função densidade possa apresentar por quase todo² espaço de fase. Métodos recentes [91] apontam com grande êxito para o estudo das propriedades espectrais de U . Numa brevíssima revisão podemos omitir, por questão de praticidade, a notação vetorial de (2.22) e escrevê-la genericamente na forma

$$[U\phi](x) = \int dy \delta(x - f(y))\phi(y). \quad (2.24)$$

É fácil observar que U possui a seguinte propriedade de semi-grupo:

$$[U^m\phi](x) = [U^{m-k}[U^k\phi]](x). \quad (2.25)$$

O estudo das propriedades de transporte é convenientemente realizado por meio da função geratriz:

$$G_n(q) = \langle e^{qA_n} \rangle, \quad (2.26)$$

na qual a média $\langle .. \rangle$ é realizada sobre um conjunto de condições iniciais para algum observável A_n ao tempo n . Nesse sentido, defini-se o operador de evolução generalizado U_q :

$$[U_q^n\phi](x) = \int dy e^{qA_n(y)} \delta(x - f^n(y))\phi(y), \quad (2.27)$$

²Como mencionamos no Capítulo 1 certos sistemas podem apresentar modos acelerados, que possuem evolução temporal extremamente regular.

no qual o kernel é integrado por um fator de peso que remete à função geratriz (2.26). Agora $G_n(q)$ pode ser escrita como

$$G_n(q) = \int dx [U_q^n \rho_0](x), \quad (2.28)$$

sendo ρ_0 a densidade inicial. A estratégia é esperar que o valor assintótico da geratriz $G_n(q)$ para longos tempos $n \rightarrow \infty$ seja controlado pelo autovalor dominante $z(q)$:

$$G_n(q) \sim z^n(q), \quad (2.29)$$

de modo semelhante ao que ocorre na mecânica estatística de sistemas em rede. Dessa forma, diversos momentos relacionados ao observável $A_n(x)$ podem ser estimados como

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \langle A_n \rangle = \partial_q \gamma(q)|_{q=0}, \quad (2.30)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \left(\langle A_n^2 \rangle - \langle A_n \rangle^2 \right) = \partial_q^2 \gamma(q)|_{q=0}, \quad (2.31)$$

...

para as quais definimos o expoente $\gamma(q)$

$$z(q) \equiv \exp[\gamma(q)], \quad (2.32)$$

conhecido como *ressonância dominante de Pollicott-Ruelle*.

O autovalor trivial $z = 1$ corresponde ao estado de equilíbrio para $q = 0$. Já o autovalor dominante não trivial para $q \neq 0$ pode ser calculado como o inverso da menor raiz da equação secular:

$$\det(1 - zU_q) = \mathcal{F}_q(z) = 0, \quad (2.33)$$

sendo $\mathcal{F}_q(z)$ usualmente conhecida como função determinante espectral. Por meio de algumas identidades formais, o determinante espectral pode ser escrito na forma

$$\begin{aligned} \det(1 - zU_q) &= \exp[\text{Tr} \ln(1 - zU_q)] \\ &= \exp \left[- \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \text{Tr}(U_q^n) \right], \end{aligned} \quad (2.34)$$

o que nos leva ao seguinte cálculo formal do traço de U_q^n :

$$\begin{aligned} \text{Tr}(U_q^n) &= \sum_{x_i = f^n(x_i)} \frac{e^{qA_n(x_i)}}{|\det(\mathbf{1} - \mathbf{D}^n(x_i))|} \\ &= \sum_p n_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{e^{rqA_p}}{|\det(\mathbf{1} - \mathbf{D}_p^r)|} \delta_{n, n_p r}. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Nas fórmulas (2.34-2.35), os cálculos estendem-se às órbitas periódicas que são soluções da equação $x = f^n(x)$, para as quais cada conjunto de órbitas de período n subdivide-se em r grupos de órbitas periódicas de período primo n_p . Deve ser dada especial atenção ao cálculo do traço (2.35). Expandindo-o ao longo de seus autovalores encontraremos

$$|\det(\mathbf{1} - \mathbf{D}_p)|^{-1} = \frac{1}{|\Lambda_p|} \prod_{e,c} \frac{1}{1 - 1/\Lambda_{p,e}} \frac{1}{1 - \Lambda_{p,c}}, \quad (2.36)$$

sendo $\Lambda_p = \prod_e \Lambda_{p,e}$, no qual os índices e e c simbolizam os autovalores expansivos e contraentes, respectivamente. Para que o cálculo da ressonância seja possível o traço (2.35) deve ser bem comportado, de forma que assume-se a hipótese de *hiperbolicidade*:

$$|\Lambda_{p,e}| > e^{\lambda_e n_p}, \quad |\Lambda_{p,c}| > e^{-\lambda_c n_p}, \quad (2.37)$$

sendo $\lambda_{e,c} > 0$ os limites inferiores para os expoentes de Lyapunov do ciclo. Dessa forma temos, para $n_p \rightarrow \infty$:

$$|\det(\mathbf{1} - \mathbf{D}_p^r)| \rightarrow |\Lambda_p|^r. \quad (2.38)$$

Esse método tem sido aplicado com grande êxito no cálculo de coeficientes de difusão para certos mapas unidimensionais e para o mapa do padeiro (*baker map*) [2, 91]. Cvitanovic, Gaspard e Eckmann também o empregaram no cálculo do coeficiente de difusão de um gás de Lorentz periódico [83]. Acreditamos, no entanto, que tal abordagem seja excessivamente complicada no tratamento do mapa (1.75), seja devido ao caráter geral das funções $f(\theta)$ e $\alpha(I)$, seja pela restrição de hiperbolicidade.

2.4 Equação Mestra

Na mecânica estatística usual o estudo dos fenômenos de transporte quase sempre envolve a solução de alguma *equação mestra* para a função de distribuição do sistema. Em um artigo relativamente recente, Bandtlow e Coveney [70] obtiveram tal equação para um sistema dinâmico determinístico arbitrário de evolução temporal discreta. A equação por eles obtida é análoga às equações mestras da mecânica estatística desenvolvidas por Prigogine e Résibois [19] e por Zwanzig [71] para sistemas de tempo contínuo. Eles partem da trivial propriedade de grupo do operador de Perron-Frobenius $\hat{U}$:

$$U^{n+1} = UU^n. \quad (2.39)$$

Defini-se então um par de operadores de projeção P e Q mutualmente ortogonais e idempotentes

$$1 = P + Q, \quad P^2 = P, \quad Q^2 = Q, \quad PQ = QP = 0, \quad (2.40)$$

que decompõem a identidade (2.39) na forma

$$\begin{cases} PU^{n+1} = PUPU^n + PUQU^n, \\ QU^{n+1} = QUPU^n + QUQU^n. \end{cases} \quad (2.41)$$

Agora, vamos apresentar a chamada *transformada* $\mathcal{Z}$, que exerce sobre os sistemas de evolução discreta o mesmo papel que a transformada de Laplace exerce sobre os sistemas de evolução contínua. Esta transformação é uma série de Laurent com expoentes não nulos. Aplicada a um operador (ou função) arbitrário, é definida como

$$\mathcal{Z}[T_n] \equiv \mathcal{T}(z) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} T_n z^{-n}, \quad (2.42)$$

sendo z uma variável complexa. Em particular, quando $T_n = T^n$, a série geométrica é somada resultando

$$\mathcal{T}(z) = \frac{z}{z - T}. \quad (2.43)$$

Para uma sequência $\{U^n\}$ de n -ésimas aplicações do operador de Perron-Frobenius podemos utilizar a relação (2.43) e o *teorema de inversão* da transformada $\mathcal{Z}$ (A.5) para obter a seguinte identidade

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}^{-1}[\mathcal{U}(z)] = U^n &= \frac{1}{2\pi i} \oint_C dz z^{n-1} \mathcal{U}(z) \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint_C dz \frac{z^n}{z - U}, \end{aligned} \quad (2.44)$$

na qual C é um contorno fechado envolvendo todas as singularidades do resolvente. A seguinte relação é definida como *teorema do deslocamento* (A.6):

$$\mathcal{Z}[U^{n+k}] = z^k \left[\mathcal{U}(z) - \sum_{n=0}^{k-1} U^n z^{-n} \right]. \quad (2.45)$$

Por fim, o *teorema de convolução* (A.8-A.9) para duas séries $\{U^n\}$ e $\{V^n\}$ garante que

$$\mathcal{Z} \left[\sum_{m=0}^n U^m V^{n-m} \right] = \mathcal{U}(z) \mathcal{V}(z). \quad (2.46)$$

Voltemos agora à dedução da equação mestra. Multiplicando os dois lados das duas equações em (2.41) por z^{-n} e realizando a soma em n de 0 a ∞ podemos aplicar (2.45) pelo lado esquerdo e retomar a própria definição de transformada $\mathcal{Z}$ pelo lado direito de modo a obter

$$\begin{cases} z[PU(z) - PU^0] = PUPU(z) + PUQU(z), \\ z[QU(z) - QU^0] = QUPU(z) + QUQU(z). \end{cases} \quad (2.47)$$

A segunda equação de (2.47) é uma equação linear do tipo $x = a + bx$ para $x \equiv QU(z)$, cuja solução pode ser facilmente deduzida iterando-a sucessivamente e obtendo a forma $x = \sum_{m=0}^{\infty} b^m a$, cujo resultado será

$$\begin{aligned} QU(z) &= \sum_{m=0}^{\infty} (z^{-1}QUQ)^m [QU^0 + z^{-1}QUPU(z)] \\ &= \frac{z}{z - QUQ} Q + \frac{1}{z - QUQ} QUPU(z) \end{aligned} \quad (2.48)$$

ao retomarmos $U^0 = 1$. Inserindo (2.48) na primeira equação de (2.47) obtém-se

$$z[PU(z) - P] = \left(PUP + PUQ \frac{1}{z - QUQ} QUP \right) PU(z) + PUQ \frac{z}{z - QUQ} Q. \quad (2.49)$$

A escola de Bruxelas³ criou denominações sugestivas para as versões análogas de tempo contínuo dos operadores que aparecem nas equações (2.48) e (2.49):

$$\text{propagation fragment:} \quad Q\mathcal{P}(z)Q = Q \frac{1}{z - QUQ} Q, \quad (2.50)$$

$$\text{diagonal fragment:} \quad P\mathcal{E}(z)P = PUQ\mathcal{P}(z)QUP, \quad (2.51)$$

$$\text{creation fragment:} \quad Q\mathcal{C}(z)P = Q\mathcal{P}(z)QUP, \quad (2.52)$$

$$\text{destruction fragment:} \quad P\mathcal{D}(z)Q = PUQ\mathcal{P}(z)Q. \quad (2.53)$$

Cada um destes operadores tem as seguintes transformadas $\mathcal{Z}$ inversas:

$$P_n \equiv \mathcal{Z}^{-1}[\mathcal{P}(z)] = Q(QUQ)^{n-1}Q, \quad (2.54)$$

$$E_n \equiv \mathcal{Z}^{-1}[\mathcal{E}(z)] = PUQ(QUQ)^{n-1}QUP, \quad (2.55)$$

$$C_n \equiv \mathcal{Z}^{-1}[\mathcal{C}(z)] = (QUQ)^{n-1}QUP, \quad (2.56)$$

$$D_n \equiv \mathcal{Z}^{-1}[\mathcal{D}(z)] = PUQ(QUQ)^{n-1}, \quad (2.57)$$

³Grupo de pesquisas em termodinâmica e processos irreversíveis do qual Ilya Prigogine (Prêmio Nobel de Química, 1977) foi um dos principais fundadores.

para $n \geq 1$ enquanto que, para $n = 0$,

$$P_0 = E_0 = C_0 = D_0 = 0. \quad (2.58)$$

Finalmente, tomando a transformada $\mathcal{Z}$ inversa da equação (2.49) obtém-se a equação geral:

$$PU^{n+1} = \sum_{j=0}^n \Psi_{n-j} PU^j + D_n Q, \quad (2.59)$$

para a qual

$$\Psi_j = \begin{cases} PUP & j = 0, \\ E_j = PUQ(QUQ)^{j-1}QUP & j \geq 1, \end{cases} \quad (2.60)$$

enquanto que D_n é definido por (2.57).

A equação (2.59) pode ser empregada no estudo da evolução temporal de amplitudes de probabilidade de um sistema dinâmico. Por exemplo, um mapa bidimensional periódico do tipo (1.75) possui uma coordenada limitada θ e outra ilimitada I , de forma que podemos estudar a evolução temporal das amplitudes de Fourier da função de distribuição $\rho_n(\theta, I)$. A amplitude de probabilidade associada será representada por um modo discreto m e outro contínuo q : $\rho_n(\theta, I) \rightarrow a_n(m, q)$. Aplicando a equação operacional (2.59) à amplitude inicial $a_0(m, q)$ e selecionando como estado relevante a componente $P = |q, m = 0\rangle \langle q, m = 0|$, sendo $Q = 1 - P$, obtém-se a seguinte equação mestra:

$$a_{n+1}(0, q) = \sum_{j=0}^n \Psi_{n-j} a_j(0, q) + D_n a_n(m \neq 0, q). \quad (2.61)$$

Embora (2.61) seja uma equação exata, é preciso utilizar métodos aproximados e condições de caoticidade adequadas para solucioná-la. Discutiremos esses aspectos mais detalhadamente no Capítulo 3.

2.5 Decomposição do Resolvente

A equação (2.44) nos mostra uma maneira alternativa de lidar com a operação de evolução temporal por meio do operador de Perron-Frobenius:

$$U^n = \frac{1}{2\pi i} \oint_C dz \frac{z^n}{z - U}, \quad (2.62)$$

na qual a evolução de densidades pode ser descrita por meio das propriedades espectrais do resolvente $R(z)$. Aqui a ressonância dominante de Pollicott-Ruelle $\gamma(q)$ pode ser encontrada selecionando-se os estados privilegiados que

dominam a evolução temporal assintótica $n \rightarrow \infty$ da função de distribuição. A técnica que utilizaremos aqui, desenvolvida originalmente por Prigogine, George e Henin [20], baseia-se naturalmente no uso de operadores de projeção para a seleção de estados *relevantes* e *irrelevantes*. A presente dedução da decomposição do resolvente por meio de projeções foi baseada em Balescu [68] e é uma adaptação de tratamento análogo dado ao resolvente Liouvilliano da mecânica estatística usual [20].

O resolvente $R(z)$ pode ser descrito por meio da seguinte identidade:

$$R(z) \equiv \frac{1}{z - U} = \frac{1}{z} + \frac{1}{z} U \frac{1}{z - U}. \quad (2.63)$$

Para reduzir o volume de expressões, introduz-se aqui a notação $R_0(z) \equiv z^{-1}$, ao passo que omitiremos a dependência em z de $R(z)$ e $R_0(z)$ em algumas etapas sem qualquer prejuízo de compreensão. Dessa forma, podemos reescrever (2.63) como

$$R = R_0 + R_0 U R. \quad (2.64)$$

Utilizamos então o par de operadores de projeção mutualmente ortogonais e idempotentes P e Q definidos em (2.40), que decompõem o operador de Perron-Frobenius U numa soma trivial de quatro termos

$$U = PUP + QUP + PUQ + QUQ. \quad (2.65)$$

Usualmente, o operador P projeta o resolvente sobre estados de interesse, ditos então como relevantes, enquanto que Q comporta os demais estados restantes, ditos irrelevantes. Por meio destes operadores a identidade (2.64) pode agora ser escrita na forma

$$R = R_0 + R_0 U(P + Q)R = R_0 + R_0 UPR + R_0 UQR. \quad (2.66)$$

De modo a isolar a componente relevante do resolvente podemos tomar a projeção irrelevante de (2.66):

$$QR = (QR_0 + QR_0 UPR) + (QR_0 U)QR, \quad (2.67)$$

notando que a nova equação (2.67) tem a forma linear $x = a + bx$ para $x \equiv QR$, cuja solução $x = \sum_{m=0}^{\infty} b^m a$ (seção anterior) pode ser escrita na forma

$$QR = \sum_{m=0}^{\infty} (QR_0 U)^m \{QR_0 + QR_0 UPR\}. \quad (2.68)$$

A expressão (2.68) pode ser substituída em (2.66) e rearranjada de modo a se obter

$$R = R_0 + R_0 U \sum_{m=0}^{\infty} (QR_0 U)^m QR_0 + R_0 U \sum_{m=0}^{\infty} (QR_0 U)^m PR. \quad (2.69)$$

Os operadores notáveis desenvolvidos na seção anterior surgem agora na decomposição do resolvente. O primeiro deles é o operador $\mathcal{E}(z)$, definido na equação (2.51):

$$\mathcal{E}(z) = \sum_{m=0}^{\infty} U[QR_0(z)U]^m. \quad (2.70)$$

A principal característica do operador $\mathcal{E}(z)$ é a ocorrência do operador Q : sua presença previne a transição direta entre estados privilegiados ao longo dos estados intermediários. Substituindo (2.70) em (2.69) teremos a seguinte equação para o resolvente

$$R = R_0 + R_0 \mathcal{E}(z) QR_0 + R_0 \mathcal{E}(z) PR. \quad (2.71)$$

A componente irrelevante do resolvente pode ser escrita tomando-se sua projeção QR em (2.71):

$$QR = Qz^{-1} + Qz^{-1} \mathcal{E} Q z^{-1} + Qz^{-1} \mathcal{E} PR, \quad (2.72)$$

ao passo que a componente relevante PR satisfaz a equação linear:

$$\begin{aligned} PR &= (Pz^{-1} + Pz^{-1} \mathcal{E} Q z^{-1}) + (z^{-1} P \mathcal{E} P) PR \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} Pz^{-1} (z^{-1} P \mathcal{E} P)^m (P + Pz^{-1} \mathcal{E} Q). \end{aligned} \quad (2.73)$$

A solução para PR em (2.73) será

$$PR(z) = P \frac{1}{z - P \mathcal{E}(z) P} [P + P \mathcal{D}(z) Q], \quad (2.74)$$

na qual o segundo operador notável $\mathcal{D}(z)$, definido em (2.53), relaciona-se com o operador $\mathcal{E}(z)$ por meio de

$$P \mathcal{D}(z) Q = z^{-1} P \mathcal{E}(z) Q. \quad (2.75)$$

A componente irrelevante QR pode ser obtida substituindo-se (2.74) em (2.72). Antes, convém notar que

$$\begin{aligned} Qz^{-1} + Qz^{-1} \mathcal{E} Q z^{-1} &= Qz^{-1} Q (1 + Qz^{-1} \mathcal{E} Q) \\ &= Qz^{-1} Q [1 + \sum_{m=1}^{\infty} (z^{-1} Q U Q)^m] = \sum_{m=0}^{\infty} z^{-(m+1)} (Q U Q)^m \\ &= Q \mathcal{P}(z) Q, \end{aligned} \quad (2.76)$$

no qual o terceiro operador notável $\mathcal{P}(z)$ foi definido em (2.50). Portanto, QR assume a forma

$$QR(z) = Q \mathcal{C}(z) P \frac{1}{z - P \mathcal{E}(z) P} [P + P \mathcal{D}(z) Q] + Q \mathcal{P}(z) Q, \quad (2.77)$$

sendo o quarto e último operador notável $\mathcal{C}(z)$, definido em (2.52), dado por

$$Q\mathcal{C}(z)P = z^{-1}Q\mathcal{E}(z)P. \quad (2.78)$$

Por fim, o resolvente $R(z)$ pode agora ser finalmente recomposto por meio de suas projeções (2.74) e (2.77):

$$R(z) = [P + Q\mathcal{C}(z)P] \frac{1}{z - P\mathcal{E}(z)P} [P + P\mathcal{D}(z)Q] + Q\mathcal{P}(z)Q. \quad (2.79)$$

O plano de ataque que adotaremos no Capítulo 3 será a combinação da equação (2.62), como lei de evolução temporal de amplitudes, à equação de decomposição do resolvente (2.79).

Capítulo 3

Transporte em Mapas

Hamiltonianos

*With classical thermodynamics, one can calculate almost everything crudely;
with kinetic theory, one can calculate fewer things, but more accurately; and
with statistical mechanics, one can calculate almost nothing exactly.*

Eugene Wigner
in *A Critical Review of Thermodynamics*.

3.1 Análise de Fourier

As propriedades de transporte do mapa (1.75) estão intimamente relacionadas à sua periodicidade em ambas as variáveis I e θ . Torna-se natural expandir a densidade de probabilidades $\rho_n(I, \theta)$ associada numa série de Fourier, de acordo com o respectivo domínio de seu cilindro:

$$\rho_n(I, \theta) = \sum_m \int dq e^{i(m\theta + qI)} a_n(m, q). \quad (3.1)$$

Valores esperados de momentos da variável de ação I a cada instante n podem ser calculados a partir das amplitudes de probabilidade $a_n(m, q)$. Integrando-se sucessivamente por partes o valor esperado da potência I^p :

$$\langle I^p \rangle_n = \int dI d\theta \rho_n(I, \theta) I^p, \quad (3.2)$$

sendo p inteiro positivo, obtém-se a equação:

$$\langle I^p \rangle_n = (2\pi)^2 [(i \partial_q)^p a_n(q)]_{q=0}, \quad a_n(q) \equiv a_n(0, q). \quad (3.3)$$

A evolução temporal da densidade $\rho_n(I, \theta)$ é obtida por meio do operador de Perron-Frobenius U :

$$\begin{aligned} \rho_n(I, \theta) &= U \rho_{n-1}(I, \theta) \\ &= \int dI' d\theta' \langle I, \theta | U | I', \theta' \rangle \rho_{n-1}(I', \theta') \end{aligned} \quad (3.4)$$

no qual o propagador

$$\langle I, \theta | U | I', \theta' \rangle = \delta(I - I') \delta(\theta - \theta') \quad (3.5)$$

pode ser considerado como a densidade de probabilidade condicional de transição entre os estados inicial (I', θ') e final (I, θ) por meio do mapa (1.75). A lei de evolução temporal das amplitudes pode ser deduzida invertendo-se a densidade (3.1)

$$a_n(m, q) = \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_m \int dq e^{-i(m\theta + qI)} \rho_n(I, \theta), \quad (3.6)$$

e substituindo (3.4) e (3.5), por meio de (1.75), em (3.6):

$$\begin{aligned} a_n(m, q) &= (2\pi)^{-2} \int d\theta dI e^{-i(m\theta + qI)} \int d\theta' dI' \langle I, \theta | U | I', \theta' \rangle \\ &\quad \times \sum_{m'} \int dq' e^{i(m'\theta' + q'I')} a_{n-1}(m', q') \\ &= (2\pi)^{-2} \sum_{m'} \int d\theta' dI dq' \exp\{-i[(m - m')\theta' + (q - q')I]\} \\ &\quad \times \exp\{-i[mc\alpha(I) + q'Kf(\theta')]\} a_{n-1}(m', q'). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Multiplicando os dois lados de (3.7) por $e^{iI'q}$ e integrando ambos em relação a q obtém-se

$$\tilde{a}_n(m, I) = e^{-imc\alpha(I)} \sum_{m'} \mathcal{J}_{m-m'}(iK\partial_I) \tilde{a}_{n-1}(m', I), \quad (3.8)$$

sendo $\tilde{a}_n(m, q)$ a transformada de Fourier de $a_n(m, q)$:

$$\tilde{a}_n(m, I) \equiv \int dq a_n(m, q) e^{iIq}. \quad (3.9)$$

O operador diferencial $\mathcal{J}_{m-m'}(iK\partial_I)$ em (3.8) é obtido considerando-se que

$$a(q + x) = \exp(x \partial_q) a(q). \quad (3.10)$$

para funções analíticas. A função $\mathcal{J}_m(x)$ obtida tem a forma

$$\mathcal{J}_m(x) = \frac{1}{2\pi} \int d\theta \exp\{i[-m\theta + xf(\theta)]\}, \quad (3.11)$$

que admite a seguinte expansão em série:

$$\mathcal{J}_m(x) = \delta_{m,0} + \sum_{n=1}^{\infty} c_{m,n} x^n \quad (3.12)$$

cujos coeficientes $c_{m,n}$ são

$$c_{m,n} = \frac{1}{2\pi} \frac{i^n}{n!} \int d\theta f^n(\theta) e^{-im\theta}. \quad (3.13)$$

Se $f(\theta)$ for uma função ímpar, os coeficientes $c_{m,n}$ serão reais para todos inteiros $\{m, n\}$ e $\mathcal{J}_{-m}(z) = \mathcal{J}_m(-z)$.

A evolução temporal das amplitudes transformadas (3.8) pode ser escrita de forma mais adequada linearizando-se a fase periódica $\alpha(I)$ por meio de uma série de Fourier:

$$\exp[-imc\alpha(I)] = \sum_l \mathcal{G}_l(r, mc) e^{-i(l/r)I}, \quad (3.14)$$

para a qual o coeficiente $\mathcal{G}_l(r, x)$ será

$$\mathcal{G}_l(r, x) = \frac{1}{2\pi} \int d\theta \exp\{-i[x\alpha(r\theta) - l\theta]\}. \quad (3.15)$$

A lei de evolução (3.8) tem agora a forma

$$\tilde{a}_n(m, I) = \sum_l \mathcal{G}_l(r, mc) e^{-i(l/r)I} \sum_{m'} \mathcal{J}_{m-m'}(iK\partial_I) \tilde{a}_{n-1}(m', I). \quad (3.16)$$

Podemos retomar a lei de evolução das amplitudes $a_n(m, q)$ tomando-se a transformada de Fourier de (3.16) por meio de sua multiplicação à direita por e^{-iqI} e posterior integração em I , lembrando que

$$a_n(m, q) = \frac{1}{2\pi} \int dI \tilde{a}_n(m, q) e^{-iIq}. \quad (3.17)$$

O resultado será

$$a_n(m, q) = \sum_{m'} \int dq' \mathcal{A}_m(r, c, q' - q) \mathcal{J}_{m-m'}(-Kq') a_{n-1}(m', q'), \quad (3.18)$$

sendo a amplitude $A_m(r, c, x)$ definida por

$$\mathcal{A}_m(r, c, x) = \sum_l \delta(lr^{-1} - x) \mathcal{G}_l(r, mc). \quad (3.19)$$

As densidades iniciais são concentradas nas condições iniciais, de tal forma que $\rho_0 = \delta(I - I_0)\delta(\theta - \theta_0)$. É fácil concluir que amplitudes iniciais serão dadas por

$$\tilde{a}_0(m, I) = \frac{1}{(2\pi)} e^{-im\theta_0} \delta(I - I_0), \quad (3.20)$$

$$a_0(m, q) = \frac{1}{(2\pi)^2} e^{-i(m\theta_0 + qI_0)}. \quad (3.21)$$

Além da densidade inicial $\rho_0(\theta_0, I_0)$ devemos definir a função de distribuição $\phi(\theta_0, I_0)$ que lança o elemento de área de condições iniciais $d\theta_0 dI_0$ sob o cilindro ao longo da dinâmica (1.75) com probabilidade $\phi(\theta_0, I_0) d\theta_0 dI_0$. Essa distribuição dependerá da natureza do problema físico que será modelado pelo mapa. Em todo caso, a exemplo da solução do problema do passeio aleatório, em regime caótico essa escolha particular não deve afetar o cálculo do coeficiente de difusão, assim como dos demais coeficientes de transporte. No presente trabalho consideraremos que as variáveis (θ_0, I_0) são uniformemente distribuídas no domínio do cilindro.

3.2 Ressonância de Pollicott-Ruelle

Estabelecida a lei de evolução temporal das amplitudes de probabilidade na seção anterior, podemos aplicar agora o método de decomposição do resolvente $R(z)$ por meio dos operadores de projeção estudados na seção (2.7). A lei de evolução (3.18) pode ser escrita na forma $a_n(m, q) = U^n a_0(m, q)$. E também vimos que a n -ésima aplicação do operador de Perron-Frobenius pode ser tomada pela identidade

$$U^n = \frac{1}{2\pi i} \oint_C dz R(z) z^n. \quad (3.22)$$

Introduzimos agora os operadores de projeção $P = |q, 0\rangle \langle q, 0|$, que seleciona os estados relevantes $m = 0$ e o seu complementar $Q = 1 - P$, que separa os estados irrelevantes $m \neq 0$. De forma a calcular teoricamente o coeficiente de difusão

$$D = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\langle (I - I_0)^2 \rangle_n}{2n}, \quad (3.23)$$

assim como quaisquer outros coeficientes de transporte ou momentos na variável de ação I , devemos tomar a projeção $PR(z)$ do resolvente em (3.22) uma vez que tais cálculos são considerados no estado $m = 0$ ao tempo n ,

como podemos notar em (3.3). Naturalmente, essa projeção pode ser dividida em duas partes:

$$PR(z) = PR(z)P + PR(z)Q. \quad (3.24)$$

O termo $PR(z)Q$ poderá ser negligenciado porque atuará num estado inicial cujo resultado envolverá amplitudes do tipo $a_0(m \neq 0, q) \propto e^{-im\theta_0}$, e sua contribuição para o cálculo do valor esperado deverá anular-se para condições iniciais angulares distribuídas uniformemente sobre $[-\pi, \pi)$. Portanto, a lei de evolução temporal das amplitudes relevantes de Fourier $a_n(q)$, omitindo-se tais flutuações angulares iniciais, assume a seguinte forma

$$a_n(q) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C dz \frac{z^n}{z - \sum_{j=0}^{\infty} z^{-j} \Psi_j(q)} a_0(q), \quad (3.25)$$

na qual as *funções de memória* $\Psi_j(q)$ obtidas para o sistema (1.75) serão (Apêndice B):

$$\Psi_0(q) = \mathcal{J}_0(-Kq), \quad (3.26)$$

$$\Psi_1(q) = \sum_m \mathcal{J}_{-m}(-Kq) \mathcal{J}_m(-Kq) \mathcal{G}_0(r, mc), \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{j \geq 2}(q) &= \sum_{\{m\}} \sum_{\{\lambda\}^\dagger} \mathcal{J}_{-m_1}(-Kq) \mathcal{J}_{m_j}(-Kq) \mathcal{G}_{\lambda_1}(r, m_1 c) \\ &\times \prod_{i=2}^j \mathcal{G}_{\lambda_i}(r, m_i c) \mathcal{J}_{m_{i-1}-m_i} \left[-K \left(q + r^{-1} \sum_{k=1}^{i-1} \lambda_k \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Para descrever as funções de memória (3.26 - 3.28) a seguinte convenção foi e será daqui por diante utilizada: números de onda denotados por índices latinos podem somente receber valores inteiros não nulos, enquanto que números de onda denotados por índices gregos podem receber quaisquer valores inteiros incluindo o zero¹. Para cada índice j fixo, os conjuntos de números de onda são definidos por

$$\{m\} = \{m_1, \dots, m_j\}, \quad \{\lambda\}^\dagger = \left\{ \lambda_1, \dots, \lambda_j \mid \sum_{i=1}^j \lambda_i = 0 \right\}. \quad (3.29)$$

Para calcular os coeficientes de transporte é preciso conhecer o limite hidrodinâmico $q \rightarrow 0$ das funções de memória (3.26 - 3.28). Em mapas Hamiltonianos usuais temos sempre a condição de *arrasto* nulo:

$$c_{0,1} \propto \int d\theta f(\theta) \equiv 0, \quad (3.30)$$

¹Notação é tradicionalmente utilizada nas teorias da relatividade restrita e geral.

que será adotada daqui por diante. Neste caso, Ψ_0 admite a seguinte expansão:

$$\Psi_0(q \rightarrow 0) = 1 + \mathcal{O}(q^2). \quad (3.31)$$

Em situações gerais, a exclusão de $m = 0$ nas equações (3.27) e (3.28) nos garante que

$$\Psi_j(q \rightarrow 0) = \mathcal{O}(q^2), \quad j \geq 1. \quad (3.32)$$

A integral (3.25) pode ser resolvida pelo método dos resíduos, primeiro truncando-se a série de seu denominador em $j = N$. Depois, calculando-se a raiz de seu polinômio e, ao fim, tomando-se o limite $N \rightarrow \infty$. A ressonância trivial $z = 1$ é relacionada ao estado de equilíbrio encontrado para $m = m' = q = 0$. A ressonância dominante não trivial pode ser calculada analiticamente por meio do método iterativo de Newton-Raphson para cálculo de raízes de equações do tipo $h(z) = 0$:

$$z_{n+1} = z_n - \frac{h(z_n)}{h'(z_n)} \quad (3.33)$$

para a qual

$$h(z) = z - \Psi_0(q) - \sum_{j=1}^N z^{-j} \Psi_j(q) \quad (3.34)$$

assume a forma truncada. Podemos introduzir ainda as seguintes abreviações:

$$M_q \equiv \sum_{j=0}^N \Psi_j(q), \quad N_q \equiv \sum_{j=1}^N j \Psi_j(q). \quad (3.35)$$

Para $q = 0$, $z = 1$ é pólo único. No limite hidrodinâmico $q \rightarrow 0$, a sequência de convergência das z_k raízes iteradas por meio de (3.33) será

$$\begin{aligned} z_0 &= 1, \\ z_1 &= 1 - \frac{1 - M_q}{1 + N_q} + \mathcal{O}(q^4) = M_q + \mathcal{O}(q^4), \\ z_2 &= M_q - \left[\frac{\mathcal{O}(q^4)}{1 + N_q + \mathcal{O}(q^4)} \right] = M_q + \mathcal{O}(q^4), \\ &\dots \\ z_\infty &= M_q + \mathcal{O}(q^4). \end{aligned} \quad (3.36)$$

Uma vez que a sequência z_k iterada não é influenciada por N , podemos considerar o limite $N \rightarrow \infty$, de modo que o pólo z_∞ torna-se

$$z_\infty = \sum_{j=0}^{\infty} \Psi_j(q) + \mathcal{O}(q^4). \quad (3.37)$$

A lei de evolução temporal relevante para as amplitudes $a_n(q)$ assume, a menos de termos $\mathcal{O}(q^4)$, a forma

$$a_n(q) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C dz \frac{z^n}{z - z_\infty} a_0(q), \quad (3.38)$$

válida para longos tempos $n \gg 1$, sendo z_∞ o pólo dominante. A integração de (3.38) por resíduos resultará no seguinte regime de relaxação exponencial:

$$a_n(q) = \exp[n\gamma(q)] a_0(q). \quad (3.39)$$

O expoente $\gamma(q)$, calculado como

$$\gamma(q) = \ln \sum_{j=0}^{\infty} \Psi_j(q) + \mathcal{O}(q^4), \quad (3.40)$$

será ressonância dominante de Pollicott-Ruelle do sistema a menos de termos de ordem $\mathcal{O}(q^4)$. Veremos mais adiante, na Secção 3.6, como obter correções $\mathcal{O}(q^{2l})$ sucessivas para (3.40) a partir do cálculo do coeficiente de difusão e de coeficientes de transporte de ordem superior.

- Nota: Hasegawa e Saphir abordaram esse problema no estudo particular do *standard map* [72]. Provavelmente acreditando ser intransponível o cálculo de pólos do resolvente, calcularam somente as duas primeiras funções de memória não nulas do *standard map*, $\Psi_0(q)$ e $\Psi_2(q)$, truncando o denominador do resolvente num polinômio de grau 3 e adotando as aproximações $K \gg 1$ e $Kq \ll 1$. Obtiveram como polo

$$\begin{aligned} z_0 &\approx 1 - \frac{K^2 q^2}{4} \left[1 - 2\sqrt{\frac{2}{\pi K}} \cos\left(K - \frac{5\pi}{4}\right) \right] \\ &\approx 1 - \frac{K^2 q^2}{4} (1 - 2J_2(K)), \end{aligned} \quad (3.41)$$

ou seja

$$\gamma(q) \approx -\frac{K^2 q^2}{4} (1 - 2J_2(K)). \quad (3.42)$$

Balescu foi o primeiro a perceber a importância deste trabalho, dedicando o Capítulo 15 de seu mais recente livro [68] a esclarecer e contextualizar os cálculos de Hasegawa e Saphir. Posteriormente, Khodas, Fishman e Agam [21, 22] chegaram, por método diferente mas com as mesmas aproximações, ao mesmo resultado (3.42).

A grande vantagem presente em nossos cálculos encontra-se na generalidade da abordagem que permite não somente calcular todas as funções de memória de um sistema ainda mais geral que o *standard map*, dado por (1.75), como também possibilita calcular suas expansões hidrodinâmicas controladamente. Consequentemente, as aproximações $K \gg 1$ e $q \ll 1/K$ (ou $q \ll 1/\sqrt{K}$) também são abandonadas. Como veremos a partir da Secção 3.5, o controle de ordem dessas expansões permitirá calcular coeficientes de transporte de ordem superiores à da difusão.

3.3 Difusão em Mapas Periódicos

O coeficiente de difusão (3.23) para o mapa radial (1.75) pode ser calculado a partir da expressão de cálculo de valores esperados de momentos (3.3) aplicada às equações (3.39) e (3.40):

$$D = -\frac{1}{2} \left[\partial_q^2 \sum_{j=0}^{\infty} \Psi_j(q) \right]_{q=0} \quad (3.43)$$

Uma vez que a ressonância de Pollicott-Ruelle (3.40) foi determinada no limite hidrodinâmico $q \rightarrow 0$ a menos de correções de ordem $\mathcal{O}(q^4)$, o coeficiente de difusão pode ser calculado exatamente por meio de (3.43). Aplicando essa expressão às funções de memória (3.26 - 3.28), a fórmula geral para o coeficiente de difusão D será

$$\begin{aligned} \frac{D}{D_{ql}} &= 1 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \sigma_{m,m} \operatorname{Re}[\mathcal{G}_0(r, mc)] \\ &+ \sum_{j=2}^{\infty} \sum_{\{m\}} \sum_{\{\lambda\}^\dagger} \sigma_{m_1, m_j} \mathcal{G}_{\lambda_1}(r, m_1 c) \prod_{i=2}^j \mathcal{G}_{\lambda_i}(r, m_i c) \mathcal{J}_{m_{i-1}-m_i} \left(-\frac{K}{r} \sum_{k=1}^{i-1} \lambda_k \right) \end{aligned} \quad (3.44)$$

para a qual

$$D_{ql} \equiv -c_{0,2} K^2 \quad (3.45)$$

representa o coeficiente de difusão *quase-linear*, ao passo que a matriz $\sigma_{m,m'}$ é definida por

$$\sigma_{m,m'} \equiv \frac{c_{-m,1} c_{m',1}}{c_{0,2}}. \quad (3.46)$$

A primeira novidade que notamos ao observar a fórmula geral de difusão (3.44) é que, mesmo no limite de alta estocasticidade $K \rightarrow \infty$, o

coeficiente de difusão não converge necessariamente para o valor quase-linear D_{ql} . A hipótese do regime quase-linear é baseada numa idéia conhecida como aproximação de fase aleatória, ou *random phase approximation* [32, 34]: para valores suficientemente elevados de K , a fase angular $\theta_n(I, \theta)$ oscila tão rapidamente que se torna descorrelacionada de θ . Nesse regime de alta estocasticidade, a variável de ação I também oscilaria tão intensamente que suas correlações temporais tornariam-se negligenciáveis, de modo que

$$\begin{aligned} D \approx \frac{\langle (I_1 - I_0)^2 \rangle}{2} &= \frac{K^2}{2} \langle f^2(\theta) \rangle_{unif} = \frac{K^2}{4\pi} \int d\theta f^2(\theta) \\ &= -c_{0,2} K^2 \equiv D_{ql}. \end{aligned} \quad (3.47)$$

O símbolo $\langle . \rangle_{unif}$ representa o cálculo de média no qual a variável θ está uniformemente distribuída sobre $[-\pi, \pi)$. Diversos cálculos perturbativos de coeficientes de difusão em mapas com fatores de rotação linear $c\alpha(I) = I$ sedimentaram a hipótese de fase aleatória no regime de alta estocasticidade. No entanto, se considerarmos o resultado geral (3.44) no limite $K \rightarrow \infty$, encontraremos uma soma geométrica ao longo de todos os números de onda λ_i nulos, ou seja

$$\begin{aligned} \lim_{K \rightarrow \infty} \frac{D}{D_{ql}} &= 1 + \sum_{m \neq 0} \sigma_{m,m} \sum_{j=1}^{\infty} [\mathcal{G}_0(r, mc)]^j \\ &= 1 + \sum_{m \neq 0} \sigma_{m,m} \frac{\mathcal{G}_0(r, mc)}{1 - \mathcal{G}_0(r, mc)}, \end{aligned} \quad (3.48)$$

uma vez que $|\text{Re}[\mathcal{G}_0(r, x \neq 0)]| < 1$. Portanto, exceto em situações muito particulares nas quais o parâmetro c pode anular o somatório (3.48), o coeficiente D_{ql} só pode ser atingido assintoticamente se $\mathcal{G}_0(r, x \neq 0) = 0$. Isso ocorre nos casos tradicionalmente conhecidos em que o fator de rotação $\alpha(I)$ é linear ou, como veremos a seguir, uma função não periódica de I . Em suma, o resultado assintótico (3.48) revela que fatores de rotação periódicos não lineares podem induzir significativos efeitos de memória que levam a modos de difusão mais rápidos ou mais lentos que os quase-lineares mesmo em regimes de elevada estocasticidade. Visto da perspectiva da aproximação de fase aleatória, amplamente aceita na literatura, esse resultado é bastante surpreendente.

A fórmula geral de difusão (3.44) assume uma forma mais compacta para mapas com fator de rotação linear (lrn):

$$c\alpha(I) \equiv I, \quad r = 1, \quad \mathcal{G}_\lambda(1, x) = \delta_{\lambda,x}. \quad (3.49)$$

No presente caso, $r = 1$ é tomado uma vez que a função não periódica I pode ser trocada sem nenhum prejuízo por $I \bmod 2\pi$. A fórmula para o coeficiente

de difusão D_{lrn} será

$$\frac{D_{lrn}}{D_{ql}} = 1 + \sum_{j=2}^{\infty} \sum_{\{m\}^\dagger} \sigma_{m_1, m_j} \prod_{i=2}^j \mathcal{J}_{m_{i-1}-m_i} \left(-K \sum_{k=1}^{i-1} m_k \right). \quad (3.50)$$

3.4 Fator de Rotação Não Periódico

Se o fator de rotação $\alpha(I)$ do mapa (1.75) for uma função não periódica de I , então devemos representar a função $\mathcal{G}_\lambda(r, x)$ em (3.15) agora na forma

$$\mathcal{G}_\lambda(r, x) = \frac{1}{2\pi r} \int_{-\pi r}^{\pi r} dI \exp \left\{ -i[x\alpha(I) - \lambda r^{-1}I] \right\} \quad (3.51)$$

para a qual devemos considerar o limite $r \rightarrow \infty$. Faz-se nesse caso, portanto, as seguintes transposições para o limite contínuo:

$$\lambda r^{-1} \rightarrow s, \quad (3.52)$$

$$r^{-1} \sum_{\lambda} \rightarrow \int ds, \quad (3.53)$$

$$\mathcal{G}_0(r, x) \rightarrow \mathcal{G}(0, x), \quad (3.54)$$

$$\sum_{\{\lambda\}^\dagger} \prod_i \mathcal{G}_{\lambda_i}(r, x) \rightarrow \int_{\mathcal{S}^\dagger} ds \prod_i \mathcal{G}(s_i, x). \quad (3.55)$$

Para cada j fixado o domínio de integração $\mathcal{S}_\dagger$ encerra a condição

$$\mathcal{S}_\dagger : \left\{ (s_1, \dots, s_j) \mid \sum_i s_i = 0 \right\}, \quad (3.56)$$

sendo a função $\mathcal{G}(s, x)$ definida como

$$\mathcal{G}(s, x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dI \exp \left\{ -i[x\alpha(I) - sI] \right\}. \quad (3.57)$$

Cálculos semelhantes aos realizados no Apêndice B levam às seguintes funções de memória:

$$\Psi_0(q) = \mathcal{J}_0(-Kq), \quad (3.58)$$

$$\Psi_1(q) = \sum_m \mathcal{J}_{-m}(-Kq) \mathcal{J}_m(-Kq) \mathcal{G}(0, mc), \quad (3.59)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{j \geq 2}(q) &= \sum_{\{m\}} \mathcal{J}_{-m_1}(-Kq) \mathcal{J}_{m_j}(-Kq) \int_{\mathcal{S}^\dagger} ds \mathcal{G}(s_1, m_1 c) \\ &\times \prod_{i=2}^j \mathcal{G}(s_i, m_i c) \mathcal{J}_{m_{i-1}-m_i} \left[-K \left(q + \sum_{k=1}^{i-1} s_k \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.60)$$

Por fim, o coeficiente de difusão será

$$\begin{aligned} \frac{D}{D_{ql}} &= 1 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \sigma_{m,m} \operatorname{Re}[\mathcal{G}(0, mc)] \\ &+ \sum_{j=2}^{\infty} \sum_{\{m\}} \sigma_{m_1, m_j} \int_{S^\dagger} ds \mathcal{G}(s_1, m_1 c) \prod_{i=2}^j \mathcal{G}(s_i, m_i c) \mathcal{J}_{m_{i-1}-m_i} \left(-K \sum_{k=1}^{i-1} s_k \right). \end{aligned} \quad (3.61)$$

Para os casos em que o fator de rotação é linear: $\alpha(I) = I$, temos $\mathcal{G}(s, x) = \delta(s - x)$ e a fórmula de difusão (3.61) coincide com a (3.50).

3.5 Aplicações

Para checar o resultado geral (3.44) podemos calcular explicitamente a taxa de difusão D/D_{ql} para alguns casos particulares de mapas e compará-los com simulações numéricas ou, se existirem, resultados analíticos obtidos em outras publicações. Escolhemos aqui três casos. O primeiro é o *standard map*

$$\begin{aligned} I_{n+1} &= I_n + K \sin \theta_n, \\ \theta_{n+1} &= \theta_n + I_{n+1} \quad \text{mod } 2\pi, \end{aligned} \quad (3.62)$$

cuja fórmula geral de difusão será

$$\frac{D_{sm}}{D_{ql}} = 1 + \sum_{j=2}^{\infty} \sum_{\{m\}^\dagger} (\pm \delta_{m_1, \pm 1}) (\pm \delta_{m_j, \pm 1}) \prod_{i=2}^j J_{m_{i-1}-m_i} \left(-K \sum_{k=1}^{i-1} m_k \right), \quad (3.63)$$

$$D_{ql} = \frac{K^2}{4}, \quad (3.64)$$

sendo $J_m(x)$ a função de Bessel de primeira ordem. Os primeiros termos da expansão de (3.63) coincidem com aqueles obtidos por Rechester, Rosenbluth e White [43, 44]:

$$\frac{D_{sm}}{D_{ql}} = 1 - 2J_2(K) + 2J_2^2(K) + \dots, \quad (3.65)$$

com a vantagem de termos em (3.63) uma fórmula fechada que dispensa o uso sistemático de diagramas para obtenção de ciclos de Fourier (*Fourier path method*).

O segundo caso é conhecido como *sawtooth map* e é definido como

$$\begin{aligned} I_{n+1} &= I_n + K \theta_n, \\ \theta_{n+1} &= \theta_n + I_{n+1} \quad \text{mod } 2\pi, \end{aligned} \quad (3.66)$$

sendo um mapa hiperbólico quando $|K + 2| > 2$ [73]. Sua fórmula geral de difusão será

$$\frac{D_{sw}}{D_{ql}} = 1 + \frac{6}{\pi^2} \sum_{j=2}^{\infty} \sum_{\{m\}^\dagger} \frac{(-1)^{m_j - m_1}}{m_j m_1} \prod_{i=2}^j \frac{\sin[\pi \xi_i(K)]}{\pi \xi_i(K)}, \quad (3.67)$$

$$\xi_i(K) \equiv m_{i-1} - m_i + K \sum_{k=1}^{i-1} m_k, \quad (3.68)$$

$$D_{ql} = \frac{K^2 \pi^2}{6}. \quad (3.69)$$

Como terceiro caso, definimos um mapa com fator de rotação periódico e não linear

$$\begin{aligned} I_{n+1} &= I_n + K \sin \theta_n, \\ \theta_{n+1} &= \theta_n + c \sin I_{n+1} \quad \text{mod } 2\pi, \end{aligned} \quad (3.70)$$

o qual denominaremos *double sine map*, cuja fórmula geral de difusão será

$$\begin{aligned} \frac{D}{D_{ql}} &= 1 + 2J_0(c) + \sum_{j=2}^{\infty} \sum_{\{m\}} \sum_{\{\lambda\}^\dagger} (\pm \delta_{m_1, \pm 1})(\pm \delta_{m_j, \pm 1}) J_{\lambda_1}(m_1 c) \\ &\quad \times \prod_{i=2}^j J_{\lambda_i}(m_i c) J_{m_{i-1} - m_i} \left(-K \sum_{k=1}^{i-1} \lambda_k \right), \end{aligned} \quad (3.71)$$

$$D_{ql} = \frac{K^2}{4}, \quad (3.72)$$

com o seguinte limite assintótico:

$$\lim_{K \rightarrow \infty} \frac{D}{D_{ql}} = 1 + \frac{2J_0(c)}{1 - J_0(c)}. \quad (3.73)$$

Por fim, analisaremos agora um caso de mapa com fator de rotação não periódico e não linear:

$$\begin{aligned} I_{n+1} &= I_n + K \sin \theta_n, \\ \theta_{n+1} &= \theta_n + c I_{n+1}^3 / 3 \quad \text{mod } 2\pi, \end{aligned} \quad (3.74)$$

o qual denominaremos *cubic map*. A função $\mathcal{G}(s, x)$ associada ao mapa (3.74) será dada pela função de Airy [89]:

$$\mathcal{G}(s, x) = x^{-1/3} \text{Airy}(-x^{-1/3} s). \quad (3.75)$$

Antes de começarmos o cálculo do coeficiente de difusão, é importante notar que a dependência $x^{-1/3}$ de (3.75) pode causar uma falsa impressão de divergência para a série (3.61) nos casos em que $c^{1/3} \ll 1$. Para contornar esse tipo de situação, podemos definir

$$c \equiv c_1 c_2, \quad c_2^{1/3} I \equiv x \quad (3.76)$$

e reescrever (3.74) como

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + K c_2^{1/3} \sin \theta_n, \\ \theta_{n+1} &= \theta_n + c_1 x_{n+1}^3 / 3 \pmod{2\pi}. \end{aligned} \quad (3.77)$$

De (3.76) segue que

$$(\Delta x)^2 = c_2^{2/3} (\Delta I)^2, \quad (3.78)$$

$$D_{ql}^{(x)} = c_2^{2/3} D_{ql}^{(I)}, \quad (3.79)$$

donde conclui-se que a taxa D/D_{ql} do mapa (3.74) é invariante sob a transformação (3.76), além de satisfazer à seguinte relação de escala:

$$\frac{D}{D_{ql}}(c, K) \equiv \frac{D}{D_{ql}}(c_1 c_2, K) = \frac{D}{D_{ql}}(c_1, K c_2^{1/3}). \quad (3.80)$$

Efetuada a mudança de variáveis $s_i \equiv |m_i|^{1/3} y_i$ na série (3.61) e utilizando a relação de escala (3.80), a taxa D/D_{ql} para o mapa (3.74) assume a forma

$$\begin{aligned} \frac{D}{D_{ql}} &= 1 + 2\text{Airy}(0) c_1^{-1/3} + \sum_{j=2}^{\infty} \sum_{\{m\}} c_1^{-j/3} (\pm \delta_{m_1, \pm 1}) (\pm \delta_{m_j, \pm 1}) \mu_1 \times \dots \times \mu_j \\ &\times \int_{\mathcal{Y}^\dagger} dy \text{Airy}(-\mu_1 c_1^{-1/3} y_1) \prod_{i=2}^j \text{Airy}(-\mu_i c_1^{-1/3} y_i) \\ &\times J_{m_{i-1}-m_i} \left(-K c_2^{1/3} \sum_{k=1}^{i-1} |m_k|^{1/3} y_k \right), \end{aligned} \quad (3.81)$$

sendo $\text{Airy}(0) = 3^{-2/3}/\Gamma(2/3) \approx 0,355$ e $\mu_i \equiv \text{sign}(m_i)$. Fazendo agora as seguintes imposições

$$c_1^{1/3} \gg 1, \quad K c_2^{1/3} \gg 1, \quad (3.82)$$

podemos estimar (3.81) considerando que $\text{Airy}(c_1^{-1/3} y) \approx \text{Airy}(0)$ para y suficientemente grande e $K c_2^{1/3} \gg 1$:

$$\begin{aligned} \frac{D}{D_{ql}} &\approx 1 + \sum_{j=2}^{\infty} \text{Airy}^j(0) \sum_{\{m\}} \mu_1^2 \mu_2 \times \dots \times \mu_{j-1} \mu_j^2 \\ &\times \int_{\mathcal{V}^\dagger} dv \prod_{i=2}^j J_{m_{i-1}-m_i} \left(-K c^{1/3} \sum_{k=1}^{i-1} |m_k|^{1/3} v_k \right), \end{aligned} \quad (3.83)$$

sendo $v_i \equiv c_1^{-1/3} y_i$. Tomando $j = 2$ como termo dominante da série, concluímos que

$$\frac{D}{D_{ql}} = 1 + \mathcal{O}(1/Kc^{1/3}) \quad (3.84)$$

sem qualquer oscilação, uma vez que essa correção contribui com o termo

$$2\text{Airy}^2(0) \int dy [J_0(-Kc^{1/3}y) + J_2(-Kc^{1/3}y)] = \frac{8\text{Airy}^2(0)}{Kc^{1/3}}. \quad (3.85)$$

Um aspecto interessante que emerge da descrição feita acima diz respeito ao caráter oscilatório do coeficiente de difusão em mapas com fator de rotação linear ou periódico, ao contrário do que ocorre em mapas com fatores de rotação não periódicos, que tendem ao regime quase-linear sem exibir qualquer oscilação [53]. Por exemplo, da análise feita logo acima parece razoável esperarmos que, para $\alpha(I) \sim I^p$, encontremos $D \sim D_{ql}$ sem oscilações para $Kc^{1/p} \gg 1$. Chirikov [34], ao estudar a difusividade do *standard map*, conjecturou que o aspecto oscilatório de D se devia à presença de ilhas de estabilidade e modos acelerados. Uma correta explicação para esse fenômeno, porém, permaneceu em aberto por todo esse tempo e acreditamos ter sinalizado aqui para uma resposta.

Os resultados analíticos para a taxa de difusão D/D_{ql} dos mapas *standard*, *sawtooth* e *double sine* são comparados com simulações numéricas e apresentados na Figura 3.1. A taxa de difusão para o *cubic map* também é analisada na Figura 3.2. Desconsiderando-se em alguns casos o efeito dos modos acelerados, cujas propriedades cinéticas são anômalas [74], todos os resultados teóricos estão em excelente acordo com os resultados numéricos.

- Nota 1: Os principais resultados desenvolvidos desde a Secção 3.1 até a seção 3.5 foram aceitos para publicação na revista *Physical Review Letters* [75].
- Nota 2: Desenvolvemos uma abordagem alternativa para o cálculo do coeficiente de difusão por meio da aplicação do operador de Perron-Frobenius em sua forma parcialmente diferencial, representada pela evolução temporal das amplitudes transformadas $\tilde{a}_n(m, I)$ da equação (3.16). Os resultados encontram-se no Apêndice C.

Figura 3.1: Taxas de difusão D/D_{ql} teóricas (linhas sólidas) comparadas com suas respectivas simulações numéricas calculadas para $n = 100$. Nos casos (a), (b) e (c) os cálculos foram realizados somente até primeira correção não nula em K do valor quase-linear. Um melhor ajuste na zona de baixa estocasticidade requer o cálculo continuado de mais funções de memória. (a) *Standard map*. Os modos acelerados causam o surgimento de picos ao longo dos valores de K múltiplos de 2π que decaem em intensidade com o aumento de K . (b) *Sawtooth map* e (c) *double sine map* (com a presença de modos acelerados). (d) Taxa D/D_{ql} para o *double sine map* como função de c para $K = 10^5$. A evolução angular induz modos de difusão rápidos ou lentos mesmo no regime de alta estocasticidade. Esse forte efeito de memória angular decai como $2J_0(c)/[1 - J_0(c)]$.

Figura 3.2: Taxas de difusão D/D_{ql} para o *cubic map* (3.74) em função de K . Na figura superior temos $c = 10^{-4}$, com destaque para a região de contorno pré-quase-linear: o regime quase-linear é alcançado de acordo com a previsão teórica $K \gg 10^{4/3} \approx 22$. Na figura inferior temos $c = 10^{-1}$, com destaque similar, sendo o regime quase-linear também alcançado após $K \gg 10^{1/3} \approx 2$. As regiões de baixa estocasticidade requerem o cálculo continuado de um grande número de funções de memória.

3.6 Cumulantes

A fórmula geral de difusão (3.44) fornece a descrição macroscópica de ordem mais baixa dos processos difusivos em mapas do tipo (1.75). Tal fórmula não somente engloba as propriedades difusivas normais de mapas Hamiltonianos que têm sido bastante investigados nos últimos 25 anos, como também as insere numa classe ainda mais geral de mapas cujo fator de rotação é não linear. Outra vantagem advinda desse resultado é a possibilidade de calcular coeficientes de transporte de ordem mais elevada que a difusão, o que representa uma lacuna nos métodos usuais. Uma maneira alternativa à operação (3.3) de cálculo de momentos $\langle I^p \rangle_n$ é dada pela seguinte expressão

$$F_n(q) \equiv \langle \exp[-iq(I - I_0)] \rangle_n, \quad (3.86)$$

conhecida na literatura como função de espalhamento de Van Hove ². Considerada no limite hidrodinâmico $q \rightarrow 0$ sugerido pela equação (3.2), $F_n(q)$ torna-se a função geratriz dos momentos generalizados C_l :

$$F_n(q) = \exp \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-iq)^l}{l!} C_l(n). \quad (3.87)$$

Na equação (3.87) C_l representa os chamados *momentos cumulantes* [77, 78]. Definindo a diferença $\Delta I \equiv I - I_0$, os primeiros quatro cumulantes são dados por

$$C_1 = \langle \Delta I \rangle_n, \quad (3.88)$$

$$C_2 = \langle (\Delta I)^2 \rangle_n - C_1^2, \quad (3.89)$$

$$C_3 = \langle (\Delta I)^3 \rangle_n - 3C_1C_2 - C_1^3, \quad (3.90)$$

$$C_4 = \langle (\Delta I)^4 \rangle_n - 3C_2^2 - 4C_1C_3 + 6C_1^2C_2 + C_1^4. \quad (3.91)$$

A existência de momentos cumulantes satisfazendo a equação (3.87) nem sempre é assumida a priori. É importante notar que $F_n(q)$ é analítica no entorno de $q = 0$ se e somente se todos os momentos $\langle (\Delta I)^p \rangle_n$ existirem e forem finitos. Essa condição é quebrada em casos de distribuições que comportam “caudas pesadas” [78]. Por outro lado, a função de Van Hove (3.86) pode ser explicitamente calculada para o sistema (1.75) por meio da densidade (3.1):

$$\begin{aligned} F_n(q) &= \int dI d\theta e^{-iq(I - I_0)} \rho_n(I, \theta) \\ &= (2\pi)^2 e^{iqI_0} a_n(q). \end{aligned} \quad (3.92)$$

²Função introduzida por L. Van Hove no estudo de difusão por nêutrons e técnicas de espalhamento de luz [2, 76]

Considerando a lei de evolução temporal exponencial para longos tempos (3.39) regida pela ressonância dominante de Pollicott-Ruelle $\gamma(q)$, e que a amplitude de probabilidade relevante inicial é dada por $a_0(q) = (2\pi)^{-2} e^{-iqI_0}$, a função de Van Hove é relacionada à taxa de dispersão $\gamma(q)$ por meio do limite

$$\gamma(q) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln[F_n(q)]. \quad (3.93)$$

Combinando a função geratriz (3.87) com a taxa de dispersão (3.93) seremos capazes não somente de definir, mas também de calcular os coeficientes de transporte generalizados $\mathcal{D}_{2l}$ definidos por

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{2l} &\equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \frac{C_{2l}(n)}{(2l)!} \\ &= \frac{(-1)^l}{(2l)!} \partial_q^{2l} \gamma(q)|_{q=0}. \end{aligned} \quad (3.94)$$

A condição (3.30) na qual $c_{0,1} \equiv 0$ implica que $C_1 = 0$. Neste caso, a fórmula de Einstein para o coeficiente de difusão D pode ser calculada para $l = 1$:

$$\begin{aligned} D &\equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2n} \langle (\Delta I)^2 \rangle_n \\ &= -\frac{1}{2} \partial_q^2 \gamma(q)|_{q=0}, \end{aligned} \quad (3.95)$$

enquanto que coeficiente de Burnett B [2] é obtido para $l = 2$:

$$\begin{aligned} B &\equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{4!n} \left[\langle (\Delta I)^4 \rangle_n - 3 \langle (\Delta I)^2 \rangle_n^2 \right] \\ &= \frac{1}{4!} \partial_q^4 \gamma(q)|_{q=0}. \end{aligned} \quad (3.96)$$

A partir do coeficiente de Burnett B , o cálculo de coeficientes de transporte de ordens mais elevadas torna necessário o conhecimento mais detalhado da expansão analítica da ressonância $\gamma(q)$ no limite hidrodinâmico. No caso de B , a correção $\mathcal{O}(q^4)$ da ressonância obtida em (3.40) pode ser calculada por meio da introdução da expansão $z = 1 - Dq^2 + \mathcal{O}(q^4)$ em z^{-j} localizado no denominador de (3.25):

$$z - \sum_{j=0}^{\infty} z^{-j} \Psi_j(q) = 0 \quad (3.97)$$

Lembrando que $\Psi_0(q) = 1 + \mathcal{O}(q^2)$ e $\Psi_{j \geq 1}(q) = \mathcal{O}(q^2)$, a ressonância de Pollicott-Ruelle corrigida pode ser escrita como

$$\gamma(q) = \ln \sum_{j=0}^{\infty} (1 + jDq^2) \Psi_j(q) + \mathcal{O}(q^6). \quad (3.98)$$

Em suma, nesse procedimento $\mathcal{D}_2$ é calculado exatamente e reintroduzido na ressonância $\gamma(q)$ na forma $\sim q^2 \mathcal{D}_2$, gerando correções de ordem $\mathcal{O}(q^4)$ e permitindo o cálculo exato de $\mathcal{D}_4$ via (3.94). Indutivamente, a cada correção de ordem $\sim q^{2l} \mathcal{D}_{2l}$ introduzida em $\gamma(q)$, o erro na ressonância assume a forma $\mathcal{O}(q^{2(l+2)})$, permitindo sempre o cálculo formal exato dos coeficientes de transporte posteriores.

3.7 Curtose

Um aspecto crucial da teoria de transporte em mapas Hamiltonianos no qual os resultados são bastante escassos e pouco discutidos diz respeito ao caráter não Gaussiano dos processos de difusão. O que é certo presumir, de acordo com os poucos trabalhos sobre o tema [79, 80], é que tais processos não são puramente Gaussianos embora tendam a esse cenário em escalas de tempo suficientemente longas. O primeiro indicador do desvio de uma função densidade de um contorno Gaussiano é dado pelo cumulante adimensional de quarta ordem κ definido como

$$\kappa(n) \equiv \frac{\langle (\Delta I)^4 \rangle_n}{\langle (\Delta I)^2 \rangle_n^2}, \quad (3.99)$$

conhecido em estatística por *curtose*. A curtose tem valor 3 para densidades perfeitamente Gaussianas por todo o tempo.

Podemos acompanhar na Figura 3.3 os resultados numéricos de curtoses para os três tipos de mapas estudados na seção 3.4: (a) *standard map*, (b) *double sine map* e (c) *sawtooth map*, calculados para $n = 100$ e $N = 5000$ condições iniciais. Apesar dos saltos locais promovidos por modos acelerados nos dois primeiros casos, o transporte normal de curtose igual a 3 é amplamente dominante devido ao elevado valor da escala de tempo n . O que ainda não sabemos é a qual taxa temporal essa convergência se dá, resultado que procuramos desenvolver nesta seção assim como na seguinte.

Para determinar κ é preciso considerar o cálculo de momentos de segunda e quarta ordem tornando necessário, neste último caso, um cálculo mais acurado da taxa de dispersão $\gamma(q)$. Este problema, em particular, já foi resolvido na equação (3.98) na qual a ressonância dominante de Pollicott-Ruelle foi calculada a menos de correções de ordem $\mathcal{O}(q^6)$. É conveniente traduzir κ por meio dos coeficientes de difusão D e de Burnett B . Combinando as definições (3.95) e (3.96) com (3.99) obtemos, para escalas de tempo n suficientemente longas,

$$\kappa = 3 + \frac{6B/D^2}{n}, \quad (3.100)$$

Figura 3.3: Curtose como função de K para $n = 100$ e $N = 5000$ condições iniciais: (a) *standard map*, (b) *double sine map* para $c = 5,5$ e (c) *sawtooth map*. A menos dos picos gerados pelos modos acelerados nos dois primeiros casos, a curtose tem excelente acordo com seu valor Gaussiano $\kappa = 3$ nas três situações.

confirmando a normalidade assintótica $\kappa = 3$ para $n \rightarrow \infty$. Uma vez que estamos interessados em estudar escalas de tempo que definam a transição para o regime Gaussiano, e esta transição já se dá evidentemente em regime caótico, os coeficientes de transporte podem ser estimados por meio da truncagem da ressonância (3.98) em $j = 2$. Dessa forma (3.96) pode ser aplicada em (3.98) resultando para B

$$B \approx -\frac{5}{2}D^2 + 2DD_{ql} - \frac{1}{2}D\partial_q^2\Psi_1|_{q=0} + \frac{1}{4!}\partial_q^4(\Psi_0 + \Psi_1 + \Psi_2)_{q=0}. \quad (3.101)$$

Podemos checar esses resultados calculando o coeficiente de Burnett por meio de (3.101) para alguns mapas específicos do tipo (1.75). Os casos mais simples são os mapas com fator de rotação linear, para os quais $\mathcal{G}_\lambda(1, x) = \delta_{\lambda, x}$ e $\Psi_1(q) = 0$. Neste caso calculamos B e D explicitamente para o *standard map* e para o *sawtooth map*. Para o *standard map* temos

$$\begin{aligned} \frac{B_{sm}}{D_{ql}^2} &= -\frac{1}{4} + J_0(K) + 2J_2(K) + J_4(K) + \frac{1}{2}J_4(2K) \\ &\quad + \frac{1}{2}J_4(2K) + \mathcal{O}(K^{-1}), \end{aligned} \quad (3.102)$$

$$\frac{D_{sm}}{D_{ql}} = 1 - 2J_2(K) + \mathcal{O}(K^{-1}). \quad (3.103)$$

Para o sawtooth map, teremos o seguinte conjunto de equações:

$$\begin{aligned} \frac{B_{sw}}{D_{ql}^2} &= -\frac{1}{5} - \frac{1}{3}S_3(K) + \frac{3+2K}{2+K}C_4(K) \\ &\quad + \frac{9+10K+3K^2}{(2+K)^2}S_5(K) + \mathcal{O}(K^{-2}), \end{aligned} \quad (3.104)$$

$$\frac{D_{sw}}{D_{ql}} = 1 - \frac{1}{6}S_3(K) + \mathcal{O}(K^{-2}), \quad (3.105)$$

para as quais as funções $S_j(K)$ and $C_j(K)$ são definidas por

$$S_{2j+1}(K) \equiv \sum_{m=1}^{\infty} \frac{72 \sin(\pi m K)}{(K+2)(\pi m)^{2j+1}}, \quad (3.106)$$

$$C_{2j}(K) \equiv \sum_{m=1}^{\infty} \frac{72 \cos(\pi m K)}{(K+2)(\pi m)^{2j}}, \quad (3.107)$$

$$S_{2j}(K) = C_{2j+1}(K) = 0. \quad (3.108)$$

Consideramos também um terceiro caso de mapa para o qual $f(\theta) = \theta$ e $\alpha(I) = \tan(I/2)$, que denominaremos *tangent map* (*tm*), como um exemplo

de mapa com fator de rotação não linear. A escolha desse fator de rotação foi feita de modo a evitar a presença de modos acelerados. Teremos então $\mathcal{G}_\lambda(1, x) = \frac{1}{\lambda!} W_{\lambda, -1/2}(2x)$, sendo $W_{\lambda, \mu}(x)$ a função de Whittaker [81], enquanto que demais termos seguem do *sawtooth map*. As expressões para B_{tm} e D_{tm} são muito longas e não serão representadas aqui explicitamente. Cada um dos três resultados foi comparado com seus respectivos valores numéricos nas Figuras 3.4, 3.5 e 3.6 mostrando excelente acordo entre os cálculos teóricos e numéricos.

3.8 Escalas de Tempo Características

A equação (3.100), que relaciona a dependência temporal da curtose por meio dos coeficientes de transporte D e B , sugere a existência de uma escala de tempo característica: a *escala de tempo Gaussiana* n_G , que podemos definir como

$$n_G \equiv \max_K \left[6(|B|/D^2) \right], \quad (3.109)$$

para a qual $\lceil x \rceil = \inf\{n \in \mathbb{Z} | x \leq n\}$ é conhecida como função *ceiling*. Se $n \gg n_G$, então o transporte difusivo tem aspecto Gaussiano, ao menos quando negligenciamos números de onda de ordem $\mathcal{O}(q^6)$. De fato, satisfeita esta condição, a expansão do propagador $\exp[n\gamma(q)]$ coincide com a densidade Gaussiana:

$$\begin{aligned} \exp[n\gamma(q)] &= 1 - Dnq^2 + \frac{1}{2}Dn^2\frac{\kappa}{3}q^4 + \mathcal{O}(q^6) \\ &\approx \exp(-Dnq^2) + \mathcal{O}(q^6), \end{aligned} \quad (3.110)$$

sendo κ dado pela equação (3.100). A escala de tempo Gaussiana n_G tem também uma segunda e não menos importante interpretação: no regime $n \gg n_G$, a evolução temporal das amplitudes relevantes de probabilidade torna-se Markoviana uma vez que, neste regime, as correções de ordem $\mathcal{O}(q^4)$ podem ser negligenciadas. Desta forma, podemos considerar $\gamma(q)$ dada por (3.40) como o propagador aproximado, cuja equação de evolução temporal será

$$a_n(q) \approx \sum_{j=0}^{\infty} \Psi_j(q) a_{n-1}(q). \quad (3.111)$$

É instrutivo comparar nossos estudos com os únicos dois trabalhos que abordam este tema, lembrando que ambos trataram somente do *standard map*. Tabet e seus colaboradores [80] não calcularam o coeficiente de Burnett explicitamente. Eles utilizaram o método gráfico dos caminhos de Fourier

Figura 3.4: Curtose como função de K para o *standard map* com $n = 10$. Os pontos são os valores numéricos computados enquanto que a linha sólida representa o resultado teórico no regime caótico negligenciando-se termos de ordem $\mathcal{O}(K^{-1})$. Para cada valor de K , 10^5 condições iniciais aleatórias foram realizadas. O gráfico mostra bom acordo entre os resultados numéricos e teóricos, embora os modos acelerados causem aqui divergências mais acentuadas devido à ordem elevada dos momentos: $\sim (\Delta I)^4$.

Figura 3.5: Curtose como função de K para o *sawtooth map* com $n = 10$. Os pontos são os valores numéricos computados enquanto que a linha sólida representa o resultado teórico no regime caótico negligenciando-se termos de ordem $\mathcal{O}(K^{-2})$. Para cada valor de K , 10^5 condições iniciais aleatórias foram realizadas. O gráfico mostra excelente acordo entre os resultados numéricos e teóricos.

Figura 3.6: Curtose como função de K para o *tangent map* para $c = 1$ com $n = 10$. Os pontos são os valores numéricos computados enquanto que a linha sólida representa o resultado teórico no regime caótico negligenciando-se termos de ordem $\mathcal{O}(K^{-2})$. Para cada valor de K , 10^5 condições iniciais aleatórias foram realizadas. O gráfico mostra excelente acordo entre os resultados numéricos e teóricos.

desenvolvido por Rechester, Rosenbluth e White [44] para calcular os momentos $\langle(\Delta I)^4\rangle_n$ e $\langle(\Delta I)^2\rangle_n$. Seus resultados foram reinterpretados aqui no sentido de que podemos determinar a respectiva taxa B_{sm}/D_{sm}^2 por meio das equações (3.99) e (3.100). Por outro lado, Balescu [79] utilizou a equação mestra (2.61) desenvolvida por Bandtlow e Coveney [70] para determinar a lei de evolução das amplitudes relevantes. Balescu não calculou o coeficiente de Burnett e também não mostrou explicitamente sua expressão para a curtose, embora a tenha calculado graficamente. No entanto, ele estabeleceu uma interessante abordagem para resolver a equação mestra, que é não Markoviana, de forma aproximada no regime caótico. Balescu concluiu que

$$a_n(q) = F_n(q) a_0(q) \quad (3.112)$$

representa o *regime cinético* da equação mestra (2.61), obtendo o seguinte propagador $F_n(q)$:

$$F_n \approx \Psi_0^n + (n-2)\Psi_0^{n-3}\Psi_2 + \frac{1}{2}(n-5)(n-6)\Psi_0^{n-6}\Psi_2^2, \quad (3.113)$$

válido para $n \geq 6$. Em (3.113) negligenciamos funções de memória $\Psi_j(q)$ para $j \geq 3$ uma vez que Balescu calcula somente correções não Markovianas até $\Psi_2^2(q)$. Outro motivo deve-se ao fato de que funções de memória $\Psi_{j \geq 3}(q)$ contribuem, para o *standard map*, com termos de ordem $\mathcal{O}(K^{-1})$ na difusão, que podem ser negligenciados no regime caótico em primeira aproximação. O coeficiente de Burnett correspondente pode ser calculado por meio de (3.93) e (3.96), embora Balescu o tenha feito de maneira muito mais trabalhosa. Podemos então comparar a taxa B/D^2 para o *standard map* nos dois trabalhos citados anteriormente com aquela obtida no presente trabalho por meio das equações (3.102) e (3.103):

Balescu - Venegeroles:

$$\frac{B_{sm}}{D_{sm}^2} = -\frac{1}{4} + J_0(K) + J_2(K) + J_4(K) + \frac{1}{2}J_4(2K) + \mathcal{O}(K^{-1}); \quad (3.114)$$

Tabet, Saifaoui, Dezairi e Raouak:

$$\frac{B_{sm}}{D_{sm}^2} = -\frac{1}{4} + 3J_2(K) + 2J_4(2K) + \mathcal{O}(K^{-1}). \quad (3.115)$$

A taxa B_{sm}/D_{sm}^2 aqui obtida coincide com o resultado que reconstituímos de Balescu e pode ser comparada à taxa obtida indiretamente por Tabet e colaboradores. Os dois resultados são comparados na Figura 3.7. Embora as equações (3.114) e (3.115) tenham o mesmo valor assintótico:

$$\lim_{K \rightarrow \infty} \frac{B_{sm}}{D_{sm}^2} = -\frac{1}{4}, \quad (3.116)$$

são bastante diferentes tanto em fases como em amplitudes, mesmo no regime de alta estocasticidade. Desconsiderando-se o efeito de modos acelerados, a equação (3.114) está em pleno acordo com os resultados numéricos, conforme atesta a Figura 3.4. No entanto, é difícil notar essas diferenças quando a curdose é calculada em escalas de tempo demasiadamente elevadas, resultando para κ um valor muito próximo 3. Vale lembrar que Tabet e seus colaboradores utilizaram $n = 50$ em seus gráficos.

Balescu obteve o propagador (3.113) truncando a convolução temporal da equação mestra (2.61) em uma escala de tempo característica, à qual denominou *tempo de memória* n_M , estabelecendo:

$$a_{n+1}(q) \approx \sum_{j=0}^{n_c} \Psi_j(q) a_{n-j}(q), \quad (3.117)$$

e negligenciando as flutuações iniciais e definindo o tempo de corte n_c como sendo

$$n_c = \begin{cases} n & \text{para } n \leq n_M, \\ n_M & \text{para } n > n_M. \end{cases} \quad (3.118)$$

Balescu também estabeleceu que, para $n \gg n_M$, a equação (3.117) torna-se a equação Markoviana (3.111). Observando numericamente o decaimento das funções de memória ao longo do tempo para o *standard map*, ele concluiu que $n_M = 4$ para este caso e obteve o propagador (3.113).

Evidentemente, esperamos que as duas escalas de tempo n_G e n_M possam estar relacionadas:

$$n_G = n_M + 1. \quad (3.119)$$

A principal vantagem que surge da relação (3.119) é o fato de que o tempo de memória n_M pode ser calculado criteriosamente por meio de (3.109) ao invés de avaliações gráficas subjetivas. Por exemplo, embora Balescu tenha sido bem sucedido em sua descrição probabilística do *standard map*, ele não verificou a possibilidade de utilização de um tempo de memória inferior ao estipulado: $n_M = 4$. Para verificar a relação (3.119) resolvemos a equação (3.117) para sistemas do tipo (1.75) com fator de rotação linear aplicando o método de Balescu para $n_M = 2$ (a resolução encontra-se no Apêndice

D). A partir daqui, calculado o novo propagador $F_n(q)$ em (D.7), podemos empregar (3.93) para o cálculo de $\gamma(q)$ e (3.94) para o cálculo do coeficiente de Burnett, cujo resultado será

$$B \approx -\frac{5}{2}D^2 + 2DD_{ql} + \frac{1}{4!}\partial_q^4(\Psi_0 + \Psi_2)_{q=0}, \quad (3.120)$$

ou seja, exatamente a equação (3.101) para $\Psi_1 = 0$! Portanto, devemos esperar no regime caótico:

$$n_G = 3 \quad \text{para} \quad c\alpha(I) \equiv I. \quad (3.121)$$

Na Figura 3.8 podemos observar o comportamento da taxa $[6|B|/D^2]$ como função de K para o *standard map*. A predição teórica dada por (3.109) é confirmada para $K > 5$, quando o coeficiente de difusão teórico (3.44) truncado em $j = 2$ ajusta-se com seu respectivo valor numérico, conforme atesta a Figura 3.1a. Análise semelhante foi aplicada ao *sawtooth map*, que conforme as Figuras 3.1b e 3.5, tem bons ajustes de difusão e curtose a partir de $K > 1,5$, confirmando mais uma vez a relação (3.119) por meio da Figura 3.9.

É importante ressaltar que a truncagem da ressonância $\gamma(q)$ sobre as funções de memória até $j = 2$ evidentemente falha na descrição da zona de estocasticidade baixa: os efeitos das superfícies KAM e das ilhas de estabilidade tornam-se importantes à medida que K decresce, requerendo o cálculo sucessivo de um número cada vez maior de funções de memória. Por outro lado, a baixa estocasticidade invalida igualmente a abordagem de Balescu representada pelas equações (3.117) e (3.118): a crescente regularidade da dinâmica com o decréscimo de K torna necessária a inclusão dos termos de fonte envolvendo condições iniciais.

Figura 3.7: Comparação entre os dois resultados teóricos obtidos para a taxa B/D^2 para o *standard map*. A curva formada por pontos representa o resultado (3.115) de Tabet e seus colaboradores enquanto que a linha sólida, que a menos dos modos normais melhor se ajusta aos resultados numéricos da Figura 3.4, representa o resultado Balescu-Venegeroles (3.114).

Figura 3.8: Escala de tempo Gaussiana como função de K para o *standard map*. A partir de $K > 2$ temos $n_G = 3$ (ou $n_M = 2$), em pleno acordo com a relação $n_G = n_M + 1$. No entanto, é importante observar que o coeficiente de difusão tem bom ajusta na aproximação $j=2$ a partir de $K > 5$. Para $K \geq 80$ o tempo de memória n_M diminui para 1, indicando a ausência de correlações de ordem $K^{-1/2}$ para a difusão.

Figura 3.9: Escala de tempo Gaussiana como função de K para o *sawtooth map*. A partir de $K > 1,5$ a previsão $n_G = 3$ é confirmada. Para $K > 10$ o tempo de memória n_M diminui para 1, indicando a ausência de correlações de ordem K^{-1} para a difusão.

Conclusões e Perspectivas

Investigamos as propriedades de transporte de sistemas Hamiltonianos caóticos, mais especificamente de mapas bidimensionais radiais, por meio das ressonâncias de Pollicott-Ruelle $\gamma(q)$. Estas ressonâncias são relacionadas aos pólos $z(q)$ do resolvente $R(z) = (z - U)^{-1}$, sendo U o operador de Perron-Frobenius, na forma $z(q) = e^{\gamma(q)}$. O cálculo teórico controlado da ressonância dominante em seu número de onda q , por meio do uso de técnicas de operadores de projeção, permitiu não somente o cálculo exato de coeficientes de difusão como também de coeficientes de transporte de ordem superior para esses sistemas. Dessa maneira, foi possível investigar também os aspectos não-Gaussianos e não-Markovianos das distribuições de probabilidade por meio do cálculo teórico do coeficiente de Burnett, da curtose e do tempo de decaimento das funções de memória.

A abordagem empregada no estudo da classe de mapas radiais (1.75) pode ser estendida para a seguinte classe de mapas Hamiltonianos acoplados:

$$\begin{aligned} I_1' &= I_1 + K_1 f_1(\theta_j) + \mu_j g_1(\theta_1, \dots, \theta_d) \\ \theta_1' &= \theta_1 + \alpha_1(I_1', \dots, I_j') \\ &\dots \end{aligned} \tag{3.122}$$

$$\begin{aligned} I_d' &= I_d + K_d f_d(\theta_d) + \mu_d g_d(\theta_1, \dots, \theta_d) \\ \theta_d' &= \theta_d + \alpha_d(I_1', \dots, I_d') \end{aligned}$$

Utilizamos em (3.122) a notação

$$(I_j, \theta_j) \equiv (I_j(n), \theta_j(n)), \quad (I_j', \theta_j') \equiv (I_j(n+1), \theta_j(n+1)). \tag{3.123}$$

A abordagem usual é restrita ao cálculo do coeficiente de difusão para mapas acoplados cujos fatores de rotação α_j são lineares [88]. No entanto, demonstramos que fatores rotação não lineares podem induzir modos rápidos ou

lentos de difusão devido a efeitos de memória ao longo da evolução angular. Este resultado contraria a aproximação intuitiva de fase aleatória (*random phase approximation*) que é amplamente aceita [34, 32]. O cálculo da ressonância dominante de Pollicott-Ruelle $\gamma(\mathbf{q})$ do sistema de mapas acoplados (3.122) permitirá estudo detalhado análogo ao aplicado à classe de mapas (1.75). O diferencial é que sistemas acoplados de maior dimensionalidade possuem particularidades que inexistem em sistemas bidimensionais, como a difusão de Arnold [32]. É importante notar também que o estudo dos coeficientes de transporte de ordem superior à da difusão é algo ainda inexplorado para esses sistemas.

Outra questão importante que pretendemos abordar a médio/longo prazo diz respeito à fractalidade dos modos hidrodinâmicos de difusão. Em trabalho recente, Gaspard, Claus, Gilbert e Dorfman [26] mostraram que, para sistemas caóticos com dois graus de liberdade, vale a identidade fundamental

$$P_{Ruelle}(D_H) = D_H \operatorname{Re}[s_{\mathbf{q}}], \quad (3.124)$$

sendo P_{Ruelle} a pressão topológica de Ruelle, D_H a dimensão de Hausdorff do modo hidrodinâmico e $s_{\mathbf{q}}$, definido por

$$s_{\mathbf{q}} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \langle \exp[i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{I}_n - \mathbf{I}_0)] \rangle, \quad (3.125)$$

uma variante da função de espalhamento de Van Hove (3.86). Da expressão (3.124) depreende-se que

$$D_H(\mathbf{q}) = 1 + \frac{D}{\lambda} \mathbf{q}^2 + \mathcal{O}(\mathbf{q}^4) \quad (3.126)$$

sendo D o coeficiente de difusão e λ o maior expoente de Lyapunov do sistema. Portanto, a equação (3.124) relaciona quantitativamente os aspectos difusivos às instabilidades dinâmicas de sistemas caóticos. No entanto, seria tal equação válida ou generalizável para sistemas de maior dimensionalidade? Para sistemas dinâmicos que relaxam exponencialmente em longos tempos, é fácil verificar que

$$s_{\mathbf{q}} = \gamma(\mathbf{q}). \quad (3.127)$$

Em princípio, a ressonância dominante $\gamma(\mathbf{q})$ relaciona-se a grandezas que caracterizam de alguma forma a instabilidade caótica, tais como os autovalores expansivos ao longo de trajetórias periódicas, por meio da função zeta dinâmica [91]. Mas a função zeta é demasiado complexa: não há uma relação funcional clara entre $\gamma(\mathbf{q})$, que nos fornece uma equação de dispersão para os coeficientes de transporte, e grandezas ligadas à instabilidade dinâmica tais

como, por exemplo, os expoentes de Lyapunov ou a entropia de Kolmogorov-Sinai. Ainda sobre a equação (3.124), sua dedução por Gaspard e colaboradores é, de certa forma, heurística, ainda que verificada numericamente. E é natural questionar se seu desdobramento (3.126) admite coeficientes de transporte de ordem superior. Em suma, acreditamos haver espaço para contribuições significativas nesse tema dado o material que foi desenvolvido na presente tese.

Por fim, um problema que pretendemos abordar a longo prazo é o tratamento das propriedades de transporte da classe de mapas (1.75) em regimes de baixa estocasticidade, uma vez que a convergência da soma das funções de memória (3.26), (3.27) e (3.28) é extremamente lenta nesta zona. Nesse tópico, de especial interesse é o estudo da transição regularidade-caos no espaço de parâmetros, quando os coeficientes de transporte exibem características de fenômenos críticos imediatamente após quebrada a última barreira *KAM*. É sabido que alguns mapas com fator de rotação linear possuem coeficientes de difusão críticos D_c do tipo

$$D_c \sim (K - K_c)^\beta \quad (3.128)$$

imediatamente acima da zona de fronteira. Para o *standard map* temos como parâmetros críticos $K_c \approx 0,9716$ e $\beta \approx 3,01$ [35, 39]. Os aspectos gerais da criticalidade em tais mapas são bastante conhecidos, mas os resultados quantitativos ainda dependem demasiadamente de construções numéricas. Uma possibilidade de abordagem pode ser encontrada nos trabalhos de Dana, Murray, Percival, Chen e Meiss [50, 51]. O método por eles desenvolvido é complementar ao nosso: envolve a formulação de uma equação mestra Markoviana cujas somas convergem mais rapidamente em regimes de baixa estocasticidade, ao contrário das regiões de estocasticidade mais elevada. A difusão caótica foi estudada em mapas Hamiltonianos periódicos com fator de rotação linear. O modelo Markoviano é baseado na partição do espaço de fase em ressonâncias de tal forma que as probabilidades de transição são dadas pelas intersecções entre essas áreas. A equação mestra obtida tem um espectro de banda de Bloch. Os resultados foram aplicados somente ao *sawtooth map* ($f(\theta) = \theta$) para o qual encontrou-se os valores críticos $K_c \approx 0$ e $\beta \approx 2,5$, em bom acordo com os resultados numéricos. A possibilidade de que a formulação deles possa ser combinada com a nossa de forma a estabelecer regras de seleção para a soma de funções de memória determinadas por ressonâncias é algo que merece ser investigado. Se confirmada, tal formulação combinada seria extremamente promissora no estudo quantitativo das propriedades críticas de transporte de sistemas dinâmicos.

Apêndice A

Transformada $\mathcal{Z}$

A transformada $\mathcal{Z}$ de uma seqüência $\{T_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ é definida pela soma

$$\mathcal{Z}[T_n] \equiv \mathcal{T}(z) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} T_n z^{-n}. \quad (\text{A.1})$$

Faremos aqui uma brevíssima lista dos tópicos que envolvem diretamente os resultados desta tese. Uma leitura mais aprofundada sobre o assunto pode ser encontrada em [90].

Teorema A1: Seja $\{T_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ uma seqüência geometricamente ordenada

$$\|T_n\| \leq C a^n. \quad (\text{A.2})$$

A transformada $\mathcal{Z}[T_n]$ é única e holomórfica na extensão do anel $\{z : |z| > a\} \cup \{\infty\}$.

Demonstração: Notemos que $\mathcal{Z}[T_n]$ é uma série de Laurent com potências não positivas e raio de convergência r não excedendo a pela fórmula de Cauchy-Hadamard

$$r = \lim_{n \rightarrow \infty} \|T_n\|^{1/n} \leq a. \quad (\text{A.3})$$

Note que, se $T_n = T^n$, então $\mathcal{Z}[T_n]$ é idêntica à série de Von Neumann para o resolvente de T

$$\mathcal{Z}[T_n] = \sum_{n=0}^{\infty} T^n z^{-n} = \frac{z}{z - T}. \quad (\text{A.4})$$

Teorema A2 (Inversão): A transformada inversa $\mathcal{Z}^{-1}$ é dada por

$$\mathcal{Z}^{-1}[\mathcal{T}(z)] = T_n = \frac{1}{2\pi i} \oint_C dz z^{n-1} \mathcal{T}(z) \quad (\text{A.5})$$

para a qual C pode ser qualquer contorno que englobe todas as singularidades de $\mathcal{T}(z)$.

Demonstração: As integrais, para cada n , são justamente os coeficientes da série de Laurent.

Teorema A3 (Deslocamento): Se $\mathcal{Z}[T_n] = \mathcal{T}(z)$, então para $k \geq 0$

$$\mathcal{Z}[T_{n+k}] = z^k \left(\mathcal{T}(z) - \sum_{n=0}^{k-1} T_n z^{-n} \right) \quad (\text{A.6})$$

Demonstração: Segue que

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} T_{n+k} z^{-n} &= z^k \sum_{n=0}^{\infty} T_{n+k} z^{-(n+k)} \\ &= z^k \left(\sum_{n=0}^{\infty} T_n z^{-n} - \sum_{n=0}^{k-1} T_n z^{-n} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Teorema A4 (Convolução): Dados $\{T_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ e $\{T'_n\}_{n \in \mathbb{N}}$, com transformadas $\mathcal{T}(z)$ e $\mathcal{T}'(z)$ respectivamente, podemos definir a convolução das duas séries por

$$\{T_n * T'_n\}_{n \in \mathbb{N}} = \left\{ \sum_{i=0}^n T_i * T'_{n-i} \right\}_{n \in \mathbb{N}} \quad (\text{A.8})$$

cuja transformada $\mathcal{Z}$ será

$$\mathcal{Z}[T_n * T'_n] = \mathcal{T}(z) \mathcal{T}'(z). \quad (\text{A.9})$$

Demonstração: Segue que

$$\begin{aligned} \mathcal{T}(z) \mathcal{T}'(z) &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n'=0}^{\infty} T_n T'_{n'} z^{-(n+n')} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n'=0}^{\infty} T_n T'_{n'-n} z^{-n'} \\ &= \sum_{n'=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{n'} T_n T'_{n'-n} z^{-n'} = \mathcal{Z}[T_n * T'_n]. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Apêndice B

Funções de Memória

Neste Apêndice mostraremos os cálculos que levaram às funções de memória apresentadas na seção 3.3. A evolução de amplitudes de probabilidade, dada pela equação (3.18), pode ser escrita na forma compacta

$$a_n(m, q) = \sum_{m'} \int dq' \langle q, m | U | q', m' \rangle a_n(m', q'), \quad (\text{B.1})$$

na qual o propagador é dado por

$$\langle q, m | U | q', m' \rangle = \sum_l \delta(lr^{-1} + q - q') \mathcal{G}_l(r, mc) \mathcal{J}_{m-m'}(-Kq'). \quad (\text{B.2})$$

As funções de memória $\Psi_j(q)$, conforme equação (2.60)

$$\Psi_0(q) = PUP, \quad \Psi_{j \geq 1}(q) = PUQ(QUQ)^j QUP, \quad (\text{B.3})$$

são construídas por meio das aplicações dos operadores de projeção P e Q :

$$P = |q, 0\rangle \langle q, 0|, \quad Q = 1 - P = |q', m \neq 0\rangle \langle q', m \neq 0|. \quad (\text{B.4})$$

As funções de memória $\Psi_0(q)$ e $\Psi_1(q)$ seguem dos cálculos:

$$\begin{aligned} \Psi_0(q) &= PUP = \int dq_1 \langle q, 0 | U | q_1, 0 \rangle \\ &= \int dq_1 \sum_l \delta(lr^{-1} + q - q_1) \mathcal{G}_l(r, 0) \mathcal{J}_0(-Kq_1) \\ &= \int dq_1 \delta(q - q_1) \mathcal{J}_0(-Kq_1) \\ &= \mathcal{J}_0(-Kq), \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

$$\begin{aligned}
\Psi_1(q) &= PUQQUP = \sum_{m_1} \int dq_1 \langle q, 0|U|q_1, m_1\rangle \langle q_1, m_1|U|q, 0\rangle \\
&= \sum_m \sum_l \int dq_1 \delta(q - q_1) \mathcal{J}_{-m}(-Kq_1) \delta(lr^{-1} + q_1 - q) \mathcal{G}_l(r, mc) \mathcal{J}_m(-Kq) \\
&= \sum_m \mathcal{G}_0(r, mc) \mathcal{J}_{-m}(-Kq) \mathcal{J}_m(-Kq). \tag{B.6}
\end{aligned}$$

Para as funções de memória $\Psi_{j \geq 2}(q)$, segue a expressão geral

$$\begin{aligned}
\Psi_{j \geq 2}(q) &= PUQ(QUQ)^{j-1}QUP \\
&= \sum_{m_1} \dots \sum_{m_j} \int dq_1 \dots dq_j \langle q, 0|U|q_1, m_1\rangle \langle q_1, m_1|U|q_2, m_2\rangle \times \dots \\
&\quad \dots \times \langle q_{j-1}, m_{j-1}|U|q_j, m_j\rangle \langle q_j, m_j|U|q, 0\rangle. \tag{B.7}
\end{aligned}$$

O primeiro propagador $\langle q, 0|U|q_1, m_1\rangle$ contribui com o termo $\mathcal{J}_{-m_1}(-Kq)$, uma vez que o primeiro número de onda é nulo, logo $l_0 = 0$, e $q_1 = q$. Cada um dos termos intermediários seguintes contribuirá em cascata com $q_i = q + r^{-1} \sum_{k=1}^{i-1} l_k$ no argumento de $\mathcal{J}_{m_{i-1}-m_i}(-Kq_i)$. Por fim, o último termo $\langle q_j, m_j|U|q, 0\rangle$ contribui com a função $\mathcal{J}_{m_j}(-Kq)$ e com a relação $r^{-1}l_j + q_j - q = 0$, que combinada com a restrição do propagador anterior em $q_j = q + r^{-1} \sum_{k=1}^{j-1} l_k$, resulta no vínculo $\sum_{k=1}^j l_k = 0$. Temos, portanto

$$\begin{aligned}
\Psi_{j \geq 2}(q) &= \sum_{\{m\}} \sum_{\{l\}^\dagger} \mathcal{J}_{-m_1}(-Kq) \mathcal{J}_{m_j}(-Kq) \mathcal{G}_{l_1}(r, m_1 c) \\
&\quad \times \prod_{i=2}^j \mathcal{G}_{l_i}(r, m_i c) \mathcal{J}_{m_{i-1}-m_i} \left[-K \left(q + r^{-1} \sum_{k=1}^{i-1} l_k \right) \right], \tag{B.8}
\end{aligned}$$

lembrando que os números de onda m_i assumem somente valores inteiros não nulos.

Apêndice C

Expansões de Fase Nula

Uma maneira alternativa que desenvolvemos para calcular expansões para os coeficientes de transporte tem como base a equação (3.16):

$$\tilde{a}_n(m, I) = \sum_l \mathcal{G}_l(r, mc) e^{-i(l/r)I} \sum_{m'} \mathcal{J}_{m-m'}(iK\partial_I) \tilde{a}_{n-1}(m', I), \quad (\text{C.1})$$

para a qual $\mathcal{G}_l(r, x)$ e $\mathcal{J}_m(x)$ são dadas por (3.15) e (3.11) respectivamente. Por questões de simplicidade, trataremos aqui somente o caso em que o fator de rotação é linear, $c\alpha(I) \equiv I$, donde temos $\mathcal{G}_l(r, mc) = \mathcal{G}_l(1, m) = \delta_{l,m}$. Os casos não lineares recebem tratamento idêntico, motivo pelo qual podem ser omitidos numa primeira exposição. A evolução temporal das amplitudes transformadas $\tilde{a}_n(m, I)$ toma então a forma

$$\tilde{a}_n(m, I) = \sum_{m'} \hat{U}(m, m') \tilde{a}_{n-1}(m', I), \quad (\text{C.2})$$

na qual o operador $\hat{U}(m, m')$ é dado por

$$\hat{U}(m, m') = e^{-imI} \hat{\mathcal{J}}_{m-m'}, \quad \hat{\mathcal{J}}_m \equiv \mathcal{J}_m(iK\partial_I), \quad (\text{C.3})$$

sendo válida a seguinte regra de aplicação de operadores diferenciais $\hat{\mathcal{J}}_n$:

$$\hat{\mathcal{J}}_n e^{-imI}(\cdot) = e^{-imI} [\mathcal{J}_n(mK) + \hat{\mathcal{J}}_n](\cdot). \quad (\text{C.4})$$

Os momentos $\langle I^p \rangle_n$ são agora calculados por meio da seguinte integral:

$$\langle I^p \rangle_n = 2\pi \int dI \tilde{a}_n(0, I) I^p. \quad (\text{C.5})$$

Pensemos então no cálculo do coeficiente de difusão D . A contribuição *relevante* para o cálculo não deve conter termos oscilantes na variável de ação I pois resultarão em termos de média zero sobre o conjunto aleatório de condições iniciais. Portanto, o termo principal (quase-linear) é obtido tomando-se todos os números de onda m iguais a zero:

$$\begin{aligned}\tilde{a}_n(0, I) \approx \hat{U}^n(0, 0) \tilde{a}_n(0, I) &= \hat{\mathcal{J}}_0^n \tilde{a}_0(0, I) \\ &= (1 + D_{ql} \partial_I^2 + \dots)^n \tilde{a}_0(0, I).\end{aligned}\quad (\text{C.6})$$

As correções sobre a aproximação quase-linear podem ser obtidas criando-se "caroços" de números de onda m não nulos ao longo da sequência de evolução temporal de $\tilde{a}_n(m, I)$. Vejamos, por exemplo, um caroço de comprimento 3:

$$\hat{U}(0, 0) \dots \hat{U}(0, 0) \hat{U}(0, m_1) \hat{U}(m_1, m_2) \hat{U}(m_2, m_3) \hat{U}(m_3, 0) \hat{U}(0, 0) \dots \hat{U}(0, 0). \quad (\text{C.7})$$

Para um caroço de tamanho p e $n \gg p$ teremos a seguinte expansão:

$$\tilde{a}_n(0, I) = (1 + n \hat{\Sigma}_{(p)}) \hat{U}^n(0, 0) \tilde{a}_n(0, I), \quad (\text{C.8})$$

sendo $\hat{\Sigma}_{(p)}$ o *operador caroço*, que é somado para todas as combinações de números de onda. O propagador pode ser escrito na forma geral:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \tilde{a}_n(0, I) = [D_{ql} \partial_I^2 + \hat{\Sigma}_{(p)}] \tilde{a}_n(0, I). \quad (\text{C.9})$$

Um caroço de tamanho 3 é dado por

$$\begin{aligned}\hat{\Sigma}_{(3)} &= \hat{\mathcal{J}}_{-m_1} \left\{ e^{-(m_1+m_2+m_3)I} [\mathcal{J}_{m_1-m_2}(m_2K) + \mathcal{J}_{m_1-m_2}(m_3K) + \hat{\mathcal{J}}_{m_1-m_2}] \right\} \\ &\quad \times [\mathcal{J}_{m_2-m_3}(m_3K) + \hat{\mathcal{J}}_{m_2-m_3}] \hat{\mathcal{J}}_{m_3}.\end{aligned}\quad (\text{C.10})$$

Em (C.10) sobrevirão apenas os termos de fase nula: $m_1 + m_2 + m_3 = 0$. Dessa forma, $\hat{\Sigma}_{(3)}$ pode ser separado em duas partes, $\hat{\Sigma}_{(3)} = \hat{\Sigma}_1 + \hat{\Sigma}_2$, para as quais

$$\begin{aligned}\hat{\Sigma}_1 &= \{\mathcal{J}_{m_1-m_2}(m_2K) + \mathcal{J}_{m_1-m_2}[-(m_1+m_2)K]\} \hat{\mathcal{J}}_{-m_1} \hat{\mathcal{J}}_{m_1+2m_2} \hat{\mathcal{J}}_{-m_1-m_2} \\ &\quad + \mathcal{J}_{m_1+2m_2}[-(m_1+m_2)K] \hat{\mathcal{J}}_{-m_1} \hat{\mathcal{J}}_{m_1-m_2} \hat{\mathcal{J}}_{-m_1-m_2},\end{aligned}\quad (\text{C.11})$$

$$\begin{aligned}\hat{\Sigma}_2 &= \mathcal{J}_{m_1+2m_2}[-(m_1+m_2)K] \{\mathcal{J}_{m_1-m_2}(m_2K) + \mathcal{J}_{m_1-m_2}[-(m_1+m_2)K]\} \\ &\quad \times \hat{\mathcal{J}}_{-m_1} \hat{\mathcal{J}}_{m_1-m_2}.\end{aligned}\quad (\text{C.12})$$

Eliminando m_3 , as combinações de números de onda $\{(m_1, m_2)\}$ que resultam em operadores $\hat{\Sigma}_{1,2}$ não nulos até termos de ∂_I^2 fazem parte dos conjuntos:

$$\hat{\Sigma}_1 : \begin{cases} |m_1| + |m_1 + 2m_2| + |m_1 + m_2| \leq 2, \\ |m_1| + |m_1 - m_2| + |m_1 + m_2| \leq 2, \end{cases} \quad (\text{C.13})$$

$$\hat{\Sigma}_2 : |m_1| + |m_1 + m_2| \leq 2. \quad (\text{C.14})$$

Estes índices serão

$$\hat{\Sigma}_1 : \{(1, -1), (-1, 1), (0, -1), (0, 1)\}, \quad (\text{C.15})$$

$$\hat{\Sigma}_2 : \{(1, -2), (1, 0), (0, -2), (0, -1), (0, 1), (0, 2), (-1, 0), (-1, 2)\}, \quad (\text{C.16})$$

resultando para $\hat{\Sigma}_{1,2}$ os seguintes operadores:

$$\hat{\Sigma}_1 = 2\mathcal{J}_2(K) \hat{\mathcal{J}}_0 \hat{\mathcal{J}}_1^2, \quad (\text{C.17})$$

$$\begin{aligned} \hat{\Sigma}_2 = & 2\mathcal{J}_1^2(K) \hat{\mathcal{J}}_1^2 + 4\mathcal{J}_2(2K)\mathcal{J}_4(2K) \hat{\mathcal{J}}_0 \hat{\mathcal{J}}_2 \\ & + \mathcal{J}_3(K)[- \mathcal{J}_3(2K) + \mathcal{J}_3(K) + \mathcal{J}_1(2K) - \mathcal{J}_1(K)] \hat{\mathcal{J}}_1^2. \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

Combinando (C.17), (C.18) e (C.9) na integral (C.5) e lembrando a equação (3.20) para $m = 0$:

$$\tilde{a}_0(0, I) = \frac{1}{(2\pi)} \delta(I - I_0), \quad (\text{C.19})$$

temos a seguinte expansão para o coeficiente de difusão $D = (1/2) \langle (I - I_0)^2 \rangle_n$:

$$\begin{aligned} \frac{D}{D_{ql}} = & 1 - 2\mathcal{J}_2(K) - 2\mathcal{J}_1^2(K) - 2\mathcal{J}_2(2K)\mathcal{J}_4(2K) \\ & + \mathcal{J}_3(K)[\mathcal{J}_3(K) - \mathcal{J}_3(2K) + \mathcal{J}_1(2K) - \mathcal{J}_1(K)] \end{aligned} \quad (\text{C.20})$$

Para o caso particular do *standard map*, $\mathcal{J}_m(K)$ representa a função de Bessel de primeira ordem $J_m(K)$. Neste caso vale notar que, para $K \gg 1$, valem as relações assintóticas:

$$-J_2(2K)J_4(2K) \approx J_2^2(K), \quad (\text{C.21})$$

$$J_3(K)[J_3(K) - J_3(2K) + J_1(2K) - J_1(K)] \approx 2J_3^2(K) - 2J_3(K)J_3(2K), \quad (\text{C.22})$$

tornando (C.20) igual aos primeiros termos da expansão de Rechester, Rosenbluth e White [43, 44]:

$$\frac{D}{D_{ql}} = 1 - 2\mathcal{J}_2(K) - 2\mathcal{J}_1^2(K) + 2\mathcal{J}_2^2(K) + 2\mathcal{J}_3^2(K) - 2J_3(K)J_3(2K). \quad (\text{C.23})$$

Apêndice D

Método de Balescu para $n_M = 2$

Neste apêndice nós deveremos mostrar como o tempo de memória n_M na equação (3.117) pode ser tomado como $n_M = 2$ no regime caótico. Em todos os cálculos que seguem, retivemos somente potências arbitrárias de $\Psi_0(q)$ e termos de ordem $\Psi_2(q)$ e $\Psi_2^2(q)$, lembrando que $\Psi_1(q) = 0$ para mapas com fator de rotação linear $c\alpha(I) \equiv I$. Podemos considerar a equação (3.117) na forma

$$a_{n+1}(q) = F_n(q) a_n(q), \quad (\text{D.1})$$

para a qual $F_n(q)$ satisfaz a seguinte equação de evolução temporal

$$F_{n+1}(q) = \sum_{j=0}^{n_c} \Psi_j(q) F_{n-j}(q), \quad F_0(q) \equiv 1, \quad (\text{D.2})$$

onde $n_c = n$ para $n \leq n_M$ e $n_c = n_M$ para $n > n_M$. Os seis primeiros propagadores $F_n(q)$ serão

$$\begin{aligned} F_1 &= \Psi_0, \\ F_2 &= \Psi_0^2, \\ F_3 &= \Psi_0^3 + \Psi_2, \\ F_4 &= \Psi_0^4 + 2\Psi_0\Psi_2, \\ F_5 &= \Psi_0^5 + 3\Psi_0^2\Psi_2, \\ F_6 &= \Psi_0^6 + 4\Psi_0^3\Psi_2 + \Psi_2^2. \end{aligned}$$

Portanto, podemos induzir a seguinte expressão geral para $F_n(q)$:

$$F_n = \Psi_0^n + x_n \Psi_0^{n-3} \Psi_2 + y_n \Psi_0^{n-4} \Psi_2^2, \quad (\text{D.3})$$

com as seguintes condições iniciais (notando que $\Psi_0^k \Psi_2^2 \sim \Psi_2^2 \sim q^4$)

$$\begin{cases} x_1 = 0, & x_{n \geq 2} = n - 2, \\ y_{n \leq 5} = 0, & y_6 = 1. \end{cases} \quad (\text{D.4})$$

Por outro lado, para $n \geq 3$, a equação (D.2) nos dá

$$F_n = \Psi_0 F_{n-1} + \Psi_2 F_{n-3}, \quad n \geq 3. \quad (\text{D.5})$$

Substituindo a equação (D.3) em (D.5) e comparando os coeficientes obtém-se:

$$\begin{cases} x_n = x_{n-1} + 1, \\ y_n = y_{n-1} + x_{n-3}, \end{cases} \quad (\text{D.6})$$

Resolvendo o sistema (D.6) com as condições iniciais (D.4) podemos finalmente obter o propagator F_n para $n \geq 6$:

$$F_n = \Psi_0^n + (n-2)\Psi_0^{n-3}\Psi_2 + \frac{1}{2}(n-5)(n-4)\Psi_0^{n-4}\Psi_2^2. \quad (\text{D.7})$$

Um resultado muito similar ao (3.113) para longos tempos.

Referências Bibliográficas

- [1] B.R. Hunt and J.A. York., *Maxwell on Chaos*, Nonlinear Science Today **3**, 1 (1993).
- [2] P. Gaspard, *Chaos, Scattering and Statistical Mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1998).
- [3] J. Laskar, *A Numerical Experiment on the Chaotic Behavior of the Solar-System*, Nature **338**, 237 (1989).
- [4] G.J. Sussman and J. Wisdom, *Numerical Evidence that the Motion of Pluto is Chaotic*, Science **241**, 433 (1988).
- [5] J. Touma and J. Wisdom, *The Chaotic Obliquity of Mars*, Science **259**, 1294 (1993).
- [6] J. Wisdom, S.J. Peale, and F. Mignard, *The Chaotic Rotation of Hyperion*, Icarus **58**, 137 (1984).
- [7] J.-C. Roux, R.H. Simoyi, and H.L. Swinney, *Observation of a Strange Attractor*, Physica D **8**, 257 (1983).
- [8] J.-P. Eckmann, S. Oliffson Kamphorst, D. Ruelle, and S. Ciliberto, *Lyapunov exponents from time series*, Phys. Rev. A **34**, 4971 (1986).
- [9] N.S. Krilov, *Relaxation processes in statistical systems*, Nature **153**, 709 (1944).
- [10] N.S. Krilov, *Works on the Foundations of Statistical Physics* (Princeton University Press, Princeton, 1979).
- [11] H.A. Posch and W.G. Hoover, *Lyapunov instability of dense Lennard-Jones fluids*, Phys. Rev. A **38**, 473 (1988).

- [12] H.A. Posch and W.G. Hoover, *Equilibrium and nonequilibrium Lyapunov spectra for dense fluids and solids*, Phys. Rev. A **39**, 2175 (1989).
- [13] M. Pollicott, *On the Rate of Mixing of Axiom-A Flows*, Invent. Math. **81**, 413 (1985).
- [14] M. Pollicott, *Meromorphic Extensions of Generalized Zeta-Functions* Invent. Math. **85**, 147 (1986).
- [15] D. Ruelle, *Resonances of Chaotic Dynamic-Systems*, Phys. Rev. Lett. **56**, 405 (1986).
- [16] D. Ruelle, *Locating Resonances for Axiom-A Dynamic-Systems*, J. Stat. Phys. **44**, 281 (1986).
- [17] D. Ruelle, *One-Dimensional Gibbs-States and Axiom-A Diffeomorphisms*, J. Diff. Geom., **25**, 117, (1987).
- [18] D. Ruelle, *The Thermodynamic Formalism for expanding maps*, Commun. Math. Phys. **125**, 239 (1989).
- [19] I. Prigogine and P. Résibois, *Kinetics of Approach to Equilibrium*, Physica **27**, 629 (1961).
- [20] I. Prigogine, C. George, and F. Henin, *Dynamical and Statistical Descriptions of N-Body Systems*, Physica **45**, 418 (1969).
- [21] M. Khodas and S. Fishman, *Relaxation and Diffusion for the Kicked Rotor*, Phys. Rev. Lett. **84**, 2837 (2000).
- [22] M. Khodas, S. Fishman and O. Agam, *Relaxation to the invariant density for the kicked rotor*, Phys. Rev. E **62**, 4769 (2000).
- [23] J. Weber, F. Haake, P. Seba, *Frobenius-Perron resonances for maps with a mixed phase space*, Phys. Rev. Lett. **85**, 3620 (2000).
- [24] J. Weber, F. Haake, P.A. Braun, C. Manderfeld, P. Seba, *Resonances of the Frobenius-Perron operator for a Hamiltonian map with a mixed phase space* J. Phys. A: Math. Gen. **34**, 7195 (2001).
- [25] G. Blum, O. Agam, *Leading Ruelle resonances of chaotic maps*, Phys. Rev. E **62**, 1977 (2000).
- [26] P. Gaspard, I. Claus, T. Gilbert, and J.R. Dorfman, *Fractality of the hydrodynamic modes of diffusion*, Phys. Rev. Letters **86**, 1506 (2001).

- [27] K. Pance, W. Lu, S. Sridhar, *Quantum fingerprints of classical Ruelle-Pollicott resonances*, Phys. Rev. Lett. **85**, 2737 (2000).
- [28] L. Landau and E. Lifshitz, *Mecânica*, (Mir, Moscou, 1978).
- [29] H. Goldstein *Classical Mechanics* (Addison-Wesley, Reading MA, 1980).
- [30] N.A. Lemos, *Mecânica Analítica* (Editora Livraria da Física, São Paulo, 2004).
- [31] V.I. Arnold, *Métodos Matemáticos da Mecânica Clássica* (Mir, Moscou, 1979).
- [32] A.J. Lichtenberg and M.A. Lieberman, *Regular and Chaotic Dynamics* (Springer, New York, 1992).
- [33] A.J. Dragt and J.M. Finn, *Lie Series and Invariant Functions for Analytic Symplectic Maps*, J. Math. Phys. **17**, 2215 (1976).
- [34] B.V. Chirikov, *A Universal Instability of Many-Dimensional Oscillator Systems*, Phys. Reports **52**, 265 (1979).
- [35] J.M. Greene, *Method for Determining a Stochastic Transition*, J. Math. Phys. **20**, 1183 (1979).
- [36] J. Wisdom, *The origin of the Kirkwood gaps: a mapping for asteroid motion near the 3/1 commensurability*, Astron. J. **87** (3), 557 (1982).
- [37] J. Wisdom and M. Holman, *Symplectic maps for the n-body problem*, Astron. J. **102** (4), 1528 (1991).
- [38] J.T. Mendonça, *Diffusion of magnetic field lines in a toroidal geometry*, Phys. Fluids B **3**, 87 (1991).
- [39] R.S. Mackay, *Renormalization in Area Preserving Maps* (World Scientific, Singapore, River Edge, 1993); Physica D **7**, 283 (1983).
- [40] P.R. Wallace, *Mathematical Analysis of Physical Problems*, (Dover, New York, 1984).
- [41] Reichl L.E, *The Transition to Chaos in Conservative Classical Systems: Quantum Manifestations* (Springer, New York, 1992).
- [42] S.S. Abdulaev, *Construction of Mappings for Hamiltonian Systems and Their Applications* (Springer, Berlin Heidelberg, 2006).

- [43] A.B. Rechester and R.B. White, *Calculation of Turbulent Diffusion for the Chirikov-Taylor Model*, Phys. Rev. Lett. **44**, 1586 (1980).
- [44] A.B. Rechester, M.N. Rosenbluth, and R.B. White, *Fourier-Space Paths Applied to the Calculation of Diffusion for the Chirikov-Taylor Model*, Phys. Rev. A **23**, 2664 (1981).
- [45] H.D.I. Abarbanel, *Non-Linear Diffusion in Hamiltonian-Systems Exhibiting Chaotic Motion*, Physica 4D, **89** (1981).
- [46] J.R. Cary, J.D. Meiss, and A. Bhattacharjee, *Statistical Characterization of Periodic, Area-Preserving Mappings*, Phys. Rev. A **23**, 2744 (1981).
- [47] J.R. Cary and J.D. Meiss, *Rigorously Diffusive Deterministic Map*, Phys. Rev. A **24**, 2664 (1981).
- [48] J.D. Meiss, J.R. Cary, C. Grebogi, J.D. Crawford, A.N. Kaufman, and H.D.I. Abarbanel, *Correlations of Periodic, Area-Preserving Maps*, Physica D **6**, 375 (1983).
- [49] R.S. Mackay, J.D. Meiss, and I.C. Percival, *Stochasticity and Transport in Hamiltonian Systems*, Phys. Rev. Lett. **52**, 697 (1984).
- [50] I. Dana, N.W. Murray, and I.C. Percival, *Resonances and Diffusion in Periodic Hamiltonian Maps*, Phys. Rev. Lett. **62**, 233 (1989).
- [51] Q. Chen, I. Dana, J.D. Meiss, N.W. Murray, and I.C. Percival, Physica D **46**, 217 (1990).
- [52] I. Dana, *Organization of Chaos in Area-Preserving Maps*, Phys. Rev. Lett. **64**, 2339 (1990).
- [53] T. Hatori, T. Kamimura and Y.H. Hichikawa, *Turbulent-Diffusion for the Radial Twist Map*, Physica D **14**, 193 (1985).
- [54] J.L. Zhou, Y.S. Sun, J.Q. Zheng, and M.J. Valtonen, *The transfer of comets from near-parabolic to short-period orbits: map approach*, Astron. Astrophys. **364**, 887 (2000).
- [55] B.V. Chirikov and V.V. Vecheslavov, *Chaotic Dynamics of Comet Halley*, Astron. Astroph. **221**, 146 (1989).
- [56] T.Y. Petrosky, *Chaos and Cometary Clouds in the Solar-System*, Phys. Lett. A **117**, 328 (1986).

- [57] A. Punjabi, A. Verma, and A. Boozer, *Stochastic Broadening of the Separatrix of a Tokamak Divertor*, Phys. Rev. Lett. **69**, 3322 (1992).
- [58] D. del-Castillo-Negrette and P.J. Morrison, *Chaotic Transport by Rossby Waves in Shear-Flow*, Phys. Fluids A **5**, 948 (1993).
- [59] J.T. Mendonça, *Diffusion of Magnetic-Field Lines in a Toroidal Geometry*, Phys. Fluids B **3**, 87 (1991).
- [60] H. Wobig and R.H. Fowler, *The effect of Magnetic Surface Destruction on the Test Particle Diffusion in the Wendelstein-VII-A Stellarator*, Plasma Phys. Control. Fusion **30**, 721 (1988).
- [61] A. Veltri and V. Carbone, *Radiative intermittent events during Fermi's stochastic acceleration*, Phys. Rev. Lett. **92**, 143901 (2004).
- [62] A.P.S. de Moura and P.S. Letelier, *Scattering map for two black holes*, Phys. Rev. E **62**, 4784 (2000).
- [63] E. Fermi, *On the Origin of the Cosmic Radiation*, Phys. Rev. **75**, 1169 (1949).
- [64] Berg J.S., Warnock R.L., Ruth R.D. and Forest E., *Construction of Symplectic Maps for Nonlinear Motion of Particles in Accelerators*, Phys. Rev. E **49**, 722 (1994).
- [65] D.K. Arrowsmith and C.M. Place, *An Introduction to Dynamical Systems* (Cambridge University Press, Cambridge [England], 1994).
- [66] A.Y. Khinchin, *Continued Fractions*, (Dover, New York, 1997).
- [67] F. Brauer and J.A. Nohel *The Qualitative Theory of Ordinary Differential Equations: An Introduction* (Dover, New York, 1989).
- [68] R. Balescu, *Statistical Dynamics, Matter out of Equilibrium* (Imperial College Press, London, 1997).
- [69] H.H. Hasegawa and W.C. Saphir, *Unitarity and Irreversibility in Chaotic Systems*, Phys. Rev. A **46**, 7401 (1992).
- [70] Bandtlow O.F. and Coveney P.V., *On the discrete time version of the Brussels formalism* J. Phys. A: Math. Gen. **27**, 7939 (1994).
- [71] R. Zwanzig, in *Lectures in Theoretical Physics* Vol. 3, (Wiley-Interscience, New York, 1961).

- [72] H.H. Hasegawa and W.C. Saphir, *Aspects of Nonlinear Dynamics: Solitons and Chaos* (193), edited by I. Antoniou and F. Lambert, (Springer, Berlin, 1991).
- [73] V.I. Arnold and A. Avez, *Ergodic Problems of Classical Mechanics* (Benjamin, New York, 1968).
- [74] G.M. Zaslavsky, *Chaos, fractional kinetics, and anomalous transport*, Phys. Rep. **371**, 461 (2002).
- [75] R. Venegeroles, *Leading Pollicott-Ruelle Resonances and Transport in Area-Preserving Maps*, aceito para publicação no Physical Review Letters (previsão para 13/07/2007).
- [76] L. Van Hove, *Correlations in Space and Time and Born Approximation Scattering in Systems of Interacting Particles*, Phys. Rev. **95**, 249 (1954).
- [77] J. A. MacLennan, *Burnett Coefficients and Correlation Functions*, Phys. Rev. A **8**, 1479 (1979).
- [78] J.A. McLennan, *Introduction to Non-Equilibrium Statistical Mechanics* (Prentice Hall, Engewood cliffs, New Jersey, 1989).
- [79] R. Balescu, *Kinetic Theory of Area-Preserving Maps*, J. Stat. Phys. **98**, 1169 (2000).
- [80] R. Tabet, D. Saifaoui, A. Dezairi, and A. Raouak, *Contribution to the Study of the Non-Gaussian Dynamics of Stochastic Magnetic Field Lines in a Toroidal Geometry (Tokamak)*, Eur. Phys. J. AP **4**, 329 (1998).
- [81] I.S. Gradshteyn and I.M. Rizhik, *Table of Integrals, Series and Products* (Academic Press, San Diego, 2000).
- [82] J.R. Dorfman, *An Introduction to Chaos in Nonequilibrium Statistical Mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1999).
- [83] P. Cvitanovic, J.-P. Eckmann and P. Gaspard, *Transport-Properties of the Lorenz Gas in Terms of Periodic-Orbits*, Chaos, Solitons and Fractals **6** 113 (1995).
- [84] S. Tasaki and P. Gaspard, *Ficks Law and Fractality of Nonequilibrium Stationary States in a Reversible Multibaker Map*, J. Stat. Phys. **81** 935 (1995).

- [85] S. Fishman, *Wave Functions, Wigner Functions and Green Functions of Chaotic Systems* in *Supersymmetry and Trace Formulae, Chaos and Disorder* edited by I.V. Lerner, J.P. Keating and D.E. Khmelnitskii (Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York, 1999).
- [86] H. van Beijeren, *Transport Properties of Stochastic Lorentz Models*, Rev. Mod. Phys. **54**, 195 (1982).
- [87] I.M. de Schepper and M.H. Ernst, *Self-Diffusion Beyond Fick's Law*, Physica A **98**, 189 (1979).
- [88] H. Kook and J.D. Meiss, *Diffusion in Symplectic Maps*, Phys. Rev. A **41**, 4143 (1990).
- [89] M. Abramowitz and I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1972).
- [90] E.I. Jury, *Theory and Application of the Z-Transform Method* (John Wiley Sons, New York, 1964).
- [91] P. Cvitanovic et al., *Classical and Quantum Chaos* (Niels Bohr Institute, Copenhagen, 2004, www.nbi.dk/ChaosBook/).