Instituto de Física

Universidade de São Paulo

Fenômeno de difusão em espaços de fases mistos

Matheus Palmero Silva

Disciplina: Caos em Sistemas Dissipativos
Professor: Iberê Luiz Caldas

palmero@usp.br

04 de junho de 2018

Sumário

I. Introdução

Introdução histórica

- O estudo de sistemas dinâmicos têm como motivação modelar fenômenos naturais.

- Modelar a natureza, exatamente como ela é, é um grande desafio. Quanto mais perto chegamos de um modelo perfeito, mais complexa a matemática se torna.

- Poincaré foi um dos primeiros a notar que a sensibilidade das condições iniciais podem afetar drasticamente a dinâmica de um sistema complexo, conduzindo a um comportamento caótico [1].

- Este estudo está em constante desenvolvimento, especialmente hoje em dia que, com o avanço tecnológico, métodos e simulações numéricas são facilmente implementados.

Difusão

- É um processo amplamente estudado, observado em muitas áreas da ciência.

- Um processo que ocorre essencialmente por um movimento espontâneo de algum observável físico, inicialmente concentrado em uma região específica.

- Na física é geralmente associado a processos termodinâmicos [2] e a movimentação de partículas [3].

Figura 1: *Exemplo intuitivo de um processo de difusão.*

Difusão em sistemas caóticos

- Sistemas fortemente caóticos frequentemente exibem um comportamento difusivo normal, equivalente à um movimento Browniano no espaço de fases.

- Em espaços de fases mistos, uma condição inicial evoluída ao redor de estruturas estáveis pode apresentar um comportamento difusivo muito complicado [4].

- Estruturas de estabilidade influênciam muito a dinâmica, dando origem a efeitos anômalos.

A equação da difusão

- É uma equação diferencial parcial em relação ao tempo e espaço, qual descreve flutuações na densidade de uma distribuição sofrendo difusão. Em uma dimensão é escrita como

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 \rho(x,t)}{\partial x^2} \ , \tag{1}$$

  onde $\rho(x,t)$ é a densidade de distribuição e D o coeficiênte de difusão.

- Considerando uma distribuição inicial $\rho(x,0) = \delta(x - x_0)$, a solução fundamental para a equação da difusão é dada por

$$\rho(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}} e^{\frac{-(x-x_0)^2}{4Dt}} \ . \tag{2}$$

- Em termos do valor médio μ e da variância σ^2

$$\rho(x;\mu,\sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{\frac{-(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \ . \tag{3}$$

II. Descrição dos modelos

O modelo Fermi-Ulam

O mapeamento para a versão simplificada [5] do modelo é o seguinte

$$\begin{cases} V_{n+1} = |V_n - 2\varepsilon \sin(\phi_{n+1})| \\ \phi_{n+1} = [\phi_n + \frac{2}{V_n}] \; mod(2\pi) \end{cases} . \quad (4)$$

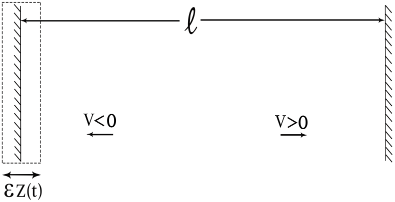

Figura 2: *Ilustação do modelo Fermi-Ulam, onde ℓ é a distância entre as duas paredes, os vetores denotam o sinal da velocidade da partícula e, $Z(t)$ é escolhido como $cos(\omega t)$, com ω a frequência de oscilação.*

O modelo *bouncer*

O mapeamento para a versão simplificada do modelo é o seguinte

$$\begin{cases} V_{n+1} = |V_n - 2\varepsilon \sin(\phi_{n+1})| \\ \phi_{n+1} = [\phi_n + 2V_n] \;\; mod(2\pi) \end{cases} . \tag{5}$$

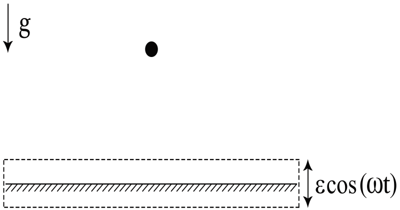

Figura 3: Ilustração do modelo *bouncer*, onde g representa a aceleração gravitacional à qual a partícula está submetida e a função $\varepsilon \cos(\omega t)$ descreve a posição da parede móvel, com ε e ω respectivamente a amplitude e a frequência de oscilação.

IV. Objetivos

$\langle V \rangle$ - Modelo Fermi-Ulam

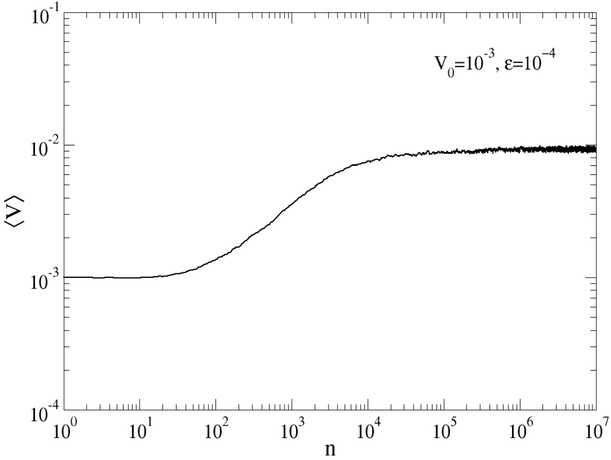

Figura 4: *Comportamento da velocidade média em função do número de iterações para o modelo Fermi-Ulam.*

$\langle V \rangle$ - Modelo *bouncer*

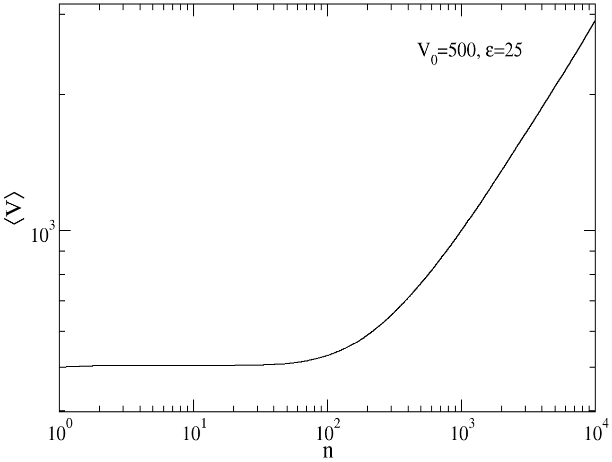

Figura 5: *Comportamento da velocidade média em função do número de iterações para o modelo bouncer.*

Objetivos principais

- Introduzir uma nova descrição analítica, baseada na solução da equação da difusão, para explicar o comportamento da variável ação durante a evolução da dinâmica.

- Existem mudanças críticas nas velocidades médias das partículas, isso deve ser explicado por uma função bem determinada.

- As predições analíticas devem concordar com o que já foi proposto fenomenologicamente na literatura [6, 7] para os modelos em questão.

V. Descrição da teoria

Difusão no espaço de fases

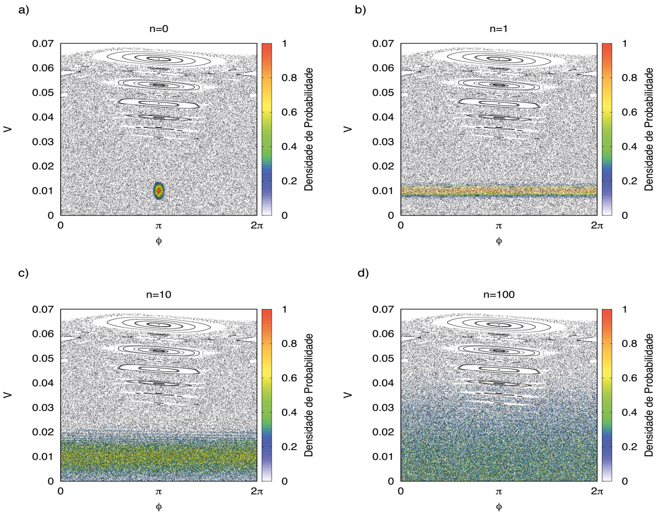

Figura 6: *Processo de difusão no espaço de fases do modelo Fermi-Ulam. A escala de cor mostra o quão provável é encontrar uma órbita naquela área do espaço de fases.*

A equação da difusão com condições de contorno

- Problemas físicos normalmente apresentam comportamentos diferentes nas proximidades das fronteiras, por isso, condições de contorno devem ser levadas em consideração.

- Um exemplo intuitivo de condição de contorno é a condição de contorno de Neumann.

$$\frac{\partial \rho(0,t)}{\partial x} = \frac{\partial \rho(L,t)}{\partial x} = 0 \ , \forall t > 0 \ , \tag{6}$$

onde $x \in [0, L]$, com $x = 0$ e $x = L$ as posições das fronteiras.

- Para resolver esse problema é interessante utilizar o método das imagens.

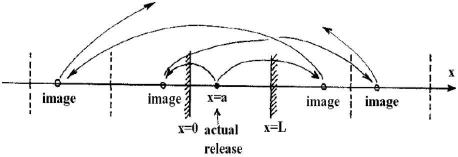

Figura 7: *Ilustração do método das imagens para uma difusão localizada. (Figura retirada do livro The Mathematics of Diffusion de Jhon Crank).*

A solução

Considerando a distribuição inicial $\rho(x,0) = \delta(x - x_0)$, a solução é a seguinte

$$\rho(x;\mu,\sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left[\text{exp}\left(\frac{-(x-2mL-\mu)^2}{2\sigma^2} \right) + \text{exp}\left(\frac{-(x-2mL+\mu)^2}{2\sigma^2} \right) \right] . \quad (7)$$

Entretanto, esta solução não esta normalizada para o intervalo $x \in [0, L]$. É necessário que $A \int_0^L \rho(x;\mu,\sigma^2)dx = 1$, com A uma constante de normalização.

Então, a solução para equação da difusão com condições de contorno de Neumann, é

$$\rho(x;\mu,\sigma^2) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi\sigma^2}} \frac{\sum_n \text{exp}\left(\frac{-(x-n-\mu)^2}{2\sigma^2} \right) + \text{exp}\left(\frac{-(x-n+\mu)^2}{2\sigma^2} \right)}{\sum_n \text{erf}\left(\frac{\mu-n}{\sqrt{2\sigma^2}} \right) - \text{erf}\left(\frac{\mu-L-n}{\sqrt{2\sigma^2}} \right) - \text{erf}\left(\frac{\mu+n}{\sqrt{2\sigma^2}} \right) + \text{erf}\left(\frac{\mu+L+n}{\sqrt{2\sigma^2}} \right)} . \quad (8)$$

A difusão que estamos interessados ocorre no espaço de fases. Especificamente no eixo da variável ação, no caso, velocidade das partículas.

Para o modelo Fermi-Ulam, a difusão ocorre em uma região finita $[0, V_{FISC}]$. V_{FISC} é a posição da primeira curva invariante do tipo *spanning*, a qual se comporta analogamente a uma fronteira. A posição da curva é $V_{FISC} \approx 2\sqrt{\varepsilon}$ [8].

Para o modelo *bouncer*, a difusão ocorre em uma região semi infinita, conforme os seguintes espaço de fases

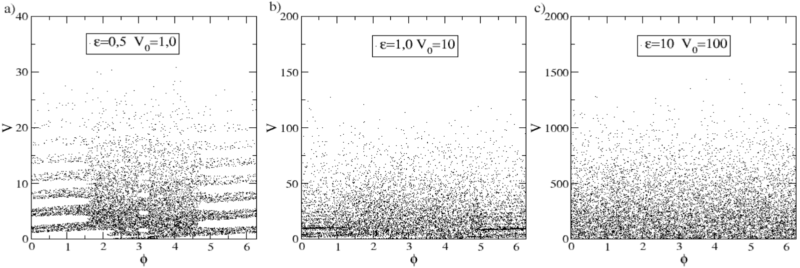

Figura 8: *Espaços de fases para diferentes parâmetros do modelo bouncer.*

Análise discreta $\rightarrow$ Análise contínua

Consideramos que a fase ϕ seja uniformemente distribuída. Assim a difusão ocorre no eixo das velocidades, por isso analisamos as expressões de V_{n+1} dos modelos. Basicamente a expressão é $V_{n+1} = V_n - 2\varepsilon \sin(\phi_{n+1})$.

Por definição $\mu \equiv \langle V \rangle$ e $\sigma^2 \equiv \langle V^2 \rangle - \langle V \rangle^2$. Então, $\mu_{n+1} = \mu_n = \mu_0 = V_0$ e $\sigma^2_{n+1} = \langle V^2_{n+1} \rangle - \langle V_{n+1} \rangle^2 = \langle V^2_n \rangle + 2\varepsilon^2 - \langle V_n \rangle^2 \;\rightarrow\; \sigma^2_{n+1} = \sigma^2_n + 2\varepsilon^2$.

Mas, pela teoria de de equações de diferença [9] que afirma que, para suficiente iterações, é possível escrever

$$\sigma^2_{n+1} - \sigma^2_n = \frac{d\sigma^2}{dn} \;\rightarrow\; \sigma^2(n) = \sigma^2_0 + 2\varepsilon^2 n \; . \tag{9}$$

Estamos interessados no comportamento da velocidade média e, por definição $\langle V \rangle = \int_0^{V_{FISC}} V \rho dx$. Utilizando a densidade ρ obtida na Eq.(8), a função que estamos procurando é a seguinte

$$\langle V \rangle = \frac{V_0}{2} \frac{\sum_j \frac{1}{z\sqrt{\pi}} (\Delta^{(1)}\text{exp} + \Delta^{(2)}\text{exp}) + \frac{1}{V_0} \left[(j - V_0)\Delta^{(1)}\text{erf} + (j + V_0)\Delta^{(2)}\text{erf} \right]}{\sum_j \text{erf}(z - j) - \text{erf}(z - \tilde{v} - j) - \text{erf}(z + j) + \text{erf}(z + \tilde{v} + j)} , \tag{10}$$

definindo a variável auxiliar $z = \frac{\mu}{\sqrt{2\sigma^2}}$, novo índice da somatória j, novo parâmetro $\tilde{v} = \frac{L}{\sqrt{2\sigma^2}} = \frac{V_{FISC}}{\sqrt{2\sigma^2}}$ e, com

$$\begin{aligned} \Delta^{(1)}\text{exp} &= e^{-(z-j)^2} - e^{-(z-j+\tilde{v})^2}, \\ \Delta^{(2)}\text{exp} &= e^{-(z+j)^2} - e^{-(z+j-\tilde{v})^2}, \\ \Delta^{(1)}\text{erf} &= \text{erf}\,(z - j + \tilde{v}) - \text{erf}\,(z - j)\,, \\ \Delta^{(2)}\text{erf} &= \text{erf}\,(z + j) - \text{erf}\,(z + j + \tilde{v})\,. \end{aligned}$$

A função $\langle V \rangle$ - Modelo *bouncer*

Utilizando resultados do modelo Fermi-Ulam, descrevemos o comportamento da velocidade média das partículas no modelo *bouncer* quando consideramos a fronteira V_{FISC} inexistente.

Assim, a solução da equação da difusão é mais simples, conhecida como *Folded Normal Distribution* [10].

$$\rho(x;\mu,\sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\left[\exp\left(\frac{-(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) + \exp\left(\frac{-(x+\mu)^2}{2\sigma^2}\right)\right] . \quad (11)$$

Calculando $\langle V \rangle = \int_0^\infty V\rho(V;\mu,\sigma^2)dV$, baseada nessa distribuição, temos que

$$\langle V \rangle = V_0\left(\frac{1}{z\sqrt{\pi}}e^{-z^2} + \text{erf}(z)\right) , \quad (12)$$

com $z = z(n) = \frac{\mu}{\sqrt{2\sigma^2}}$.

V. Resultados

Predições analíticas - Modelo Fermi-Ulam

Após uma análise cuidadosa da Eq.(10), notamos que o comportamento $\langle V \rangle$ em função do número de iterações n é alterado em dois momentos, primeiro em $z = 1$ e depois em $\tilde{v} = 1$.

- $$z = 1 \rightarrow \frac{V_0}{2\varepsilon\sqrt{n}} = 1 \rightarrow n = \left(\frac{V_0}{2\varepsilon}\right)^2 \rightarrow n = \frac{V_0^2}{4\varepsilon^2} , \tag{13}$$

  mas neste caso, $n = n_x$, marcando o primeiro *crossover*. Assim $n_x = \frac{V_0^2}{4\varepsilon^2}$.
- $$\tilde{v} = 1 \rightarrow \frac{V_{FISC}}{2\varepsilon\sqrt{n}} = 1 \rightarrow n \approx \left(\frac{2\sqrt{\varepsilon}}{2\varepsilon}\right)^2 \rightarrow n \approx \frac{1}{\varepsilon} , \tag{14}$$

  mas agora, $n = n'_x$ marcando o segundo *crossover*. Assim $n'_x \approx \frac{1}{\varepsilon}$.

Tomando o seguinte limite, o qual corresponde ao platô de saturação, temos

$$\lim_{\sigma \to \infty} \langle V \rangle = \lim_{n \to \infty} \langle V \rangle = \frac{V_{FISC}}{2} \approx \sqrt{\varepsilon} . \tag{15}$$

Abordagem analítica x Simulação numérica

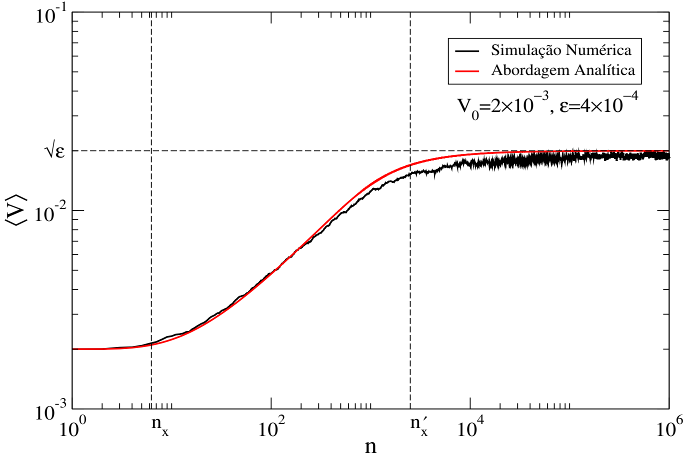

Figura 9: *Comparação entre simulação numérica e abordagem analítica para o modelo Fermi-Ulam. Um ensemble de partículas* 10^3 *foi iterado até* 10^6 *colisões.*

Abordagem analítica x Simulação numérica

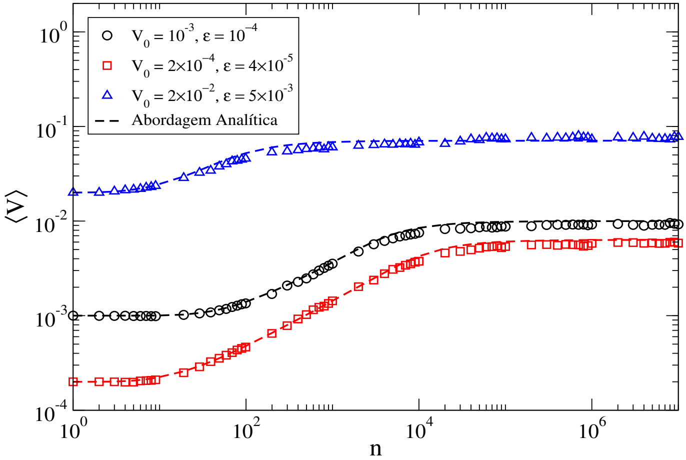

Figura 10: *Comparação entre simulação numérica e abordagem analítica para três diferentes* V_0 *e* ε*. Um ensemble de* 10^4 *partículas foi iterado até* 10^7 *colisões.*

Predições analíticas - Modelo *bouncer*

Após uma análise da Eq.(12), notamos que o comportamento $\langle V \rangle$ em função do número de iterações n é alterado somente quando $z = 1$.

$$z = 1 \;\rightarrow\; \frac{V_0}{\epsilon^2 n} = 1 \;\rightarrow\; V_0^2 = \epsilon^2 n \; ,$$

mas neste caso $n = n_x$.

Então, temos que o número de crossover é calculado por

$$n_x = \frac{V_0^2}{\epsilon^2} \; . \qquad (16)$$

Para o crescimento no limite assintótico, expandimos em série em torno de $n = \infty$, obtendo

$$\langle V \rangle = \frac{\epsilon}{\sqrt{\pi}}(n)^{\frac{1}{2}} + \frac{V_0^2}{\epsilon\sqrt{\pi}}(n)^{-\frac{1}{2}} + O(n)^{-\frac{3}{2}} \; . \qquad (17)$$

Abordagem analítica x Simulação numérica

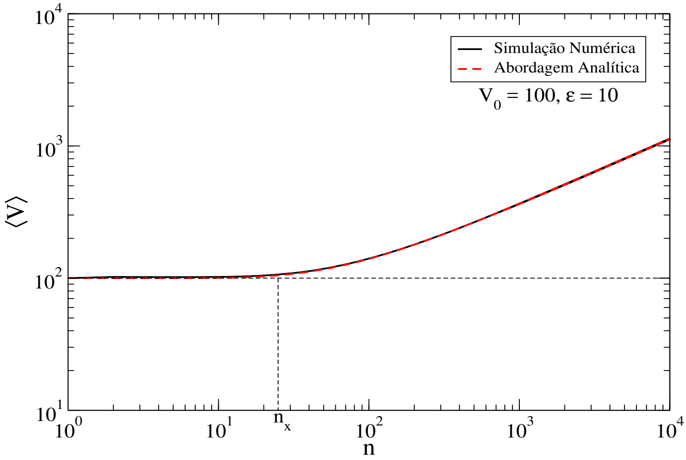

Figura 11: *Comparação entre simulação numérica e abordagem analítica para o modelo bouncer. Um ensemble de partículas* 10^4 *foi iterado até* 10^4 *colisões.*

Abordagem analítica x Simulação numérica

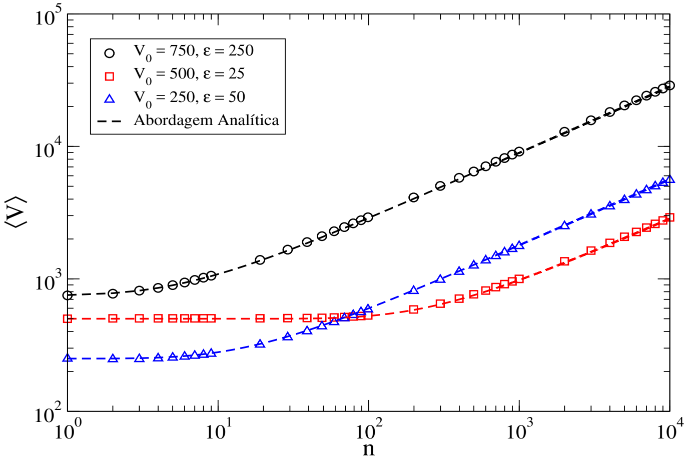

Figura 12: *Comparação entre simulação numérica e abordagem analítica para três diferentes* V_0 *e* ϵ*. Um ensemble de* 10^4 *partículas foi iterado até* 10^4 *colisões.*

Confirmações analíticas

- Para o modelo Fermi-Ulam:
  - O primeiro número de *crossover* $n_x \propto \frac{V_0^2}{\varepsilon^2}$. Confirmado pela Eq.(13);
  - O segundo número de *crossover* $n'_x \propto \frac{1}{\varepsilon}$. Confirmado pela Eq.(14);
  - O platô de saturação é proporcional a $\sqrt{\varepsilon}$. Confirmado pela Eq.(15).
- Para o modelo *bouncer*:
  - O número de *crossover* $n_x \propto \frac{V_0^2}{\epsilon^2}$. Confirmado pela Eq.(16);
  - O expoente de crescimento de $\langle V \rangle$ em relação a n é $\frac{1}{2}$. Confirmado pela Eq.(17).

VII. Considerações finais

Conclusões

- Uma nova abordagem analítica foi proposta, baseada essencialmente na solução da equação da difusão, como uma tentativa de descrever o comportamento difusivo da variável ação no espaço de fases de modelos do acelerador de Fermi.

- As predições analíticas concordam com o que foi fenomenologicamente proposto tanto para o modelo Fermi-Ulam, quanto para o modelo *bouncer*.

- Considerando suposições razoáveis, a abordagem analítica definitivamente ajusta os dados da simulação numérica.

Difusão no espaço de fases - Região mista

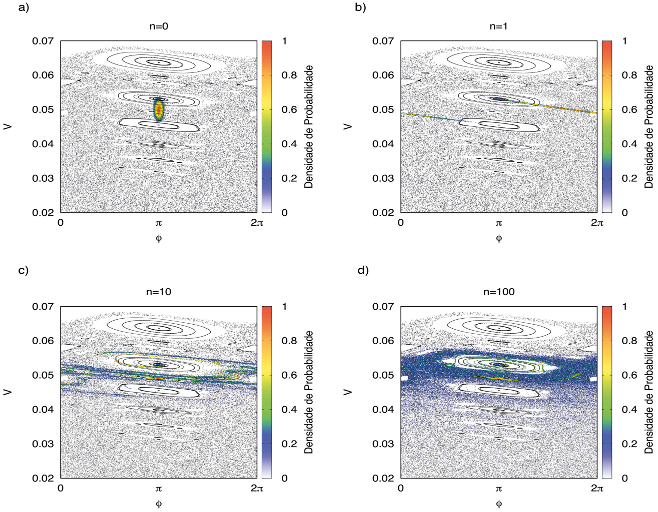

Figura 13: *Processo de difusão em uma região mista do espaço de fases do modelo Fermi-Ulam.*

Perspectivas

- Introduzir outro tipo de coeficiente de difusão para lidar com o comportamento anômalo da difusão ao redor de estruturas de estabilidade do espaço de fases.
- Aprimorar a estimativa para a posição da primeira curva invariante do tipo *spanning* do espaço de fases do modelo Fermi-Ulam.
- Estender a teoria apresentada para bilhares com fronteiras oscilantes.
- Uma vez estabelecida a abstração do conceito de difusão para diferentes tipos de análises, podemos imaginar e investigar novas analogias com outras áreas da física e da ciência em geral.

Agradecimentos

Physics | Lancaster University

unesp

FAPESP

Referências

[1] J. H. Poincaré. Acta Mathematica, vol. 13 (1890).

[2] W. F. Brown Jr., Phys. Rev., vol. 130 (1963).

[3] M. W. Evans, G. J. Evans, W. T. Coffey, P. Grigolini, Wiley (1982).

[4] G. M. Zaslavsky, Physics Reports, vol. 371 (2002).

[5] A. J. Lichtenberg e M. A. Lieberman, Spring Verlag (1992).

[6] E. D. Leonel, P. V. E. McClintock, J. K. L. da Silva, Phys. Rev. Lett., vol. 93 (2004).

[7] A. L. P. Livorati, D. G. Ladeira e E. D. Leonel, Phys. Rev. E, vol. 78 (2008).

[8] E. D. Leonel, J. A. de Oliveira, F. Saif, J. Phys. A, vol. 44 (2011).

[9] C. M. Bender, S. A. Orszag, Springer (1999).

[10] F. C. Leone, L. S. Nelson, R. B. Nottingham, Technometrics, vol.3 (1961).