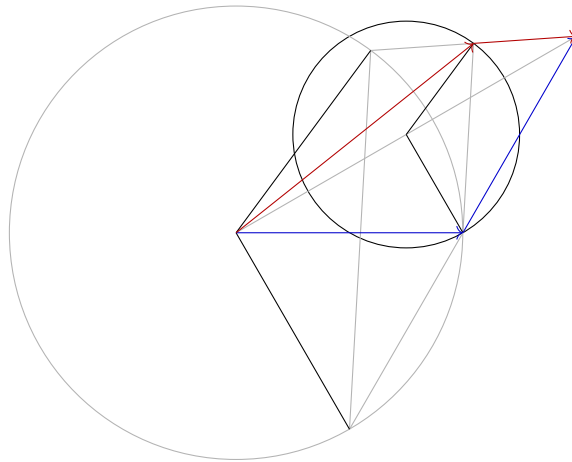




**TÉCNICO**  
LISBOA



## **Correcções Quânticas nas Equações Cinéticas**

**João O'Neill Cortes**

Dissertação para obtenção do grau de mestre em  
**Engenharia Física Tecnológica**

Orientador: Prof. João Pedro Saraiva Bizarro

### **Júri**

Presidente: Prof. Vasco António Dinis Leitão Guerra

Orientador: Prof. João Pedro Saraiva Bizarro

Vogal: Dr. Hugo Fernando Santos Terças

**Junho 2018**



*Aos meus pais.*



## **Agradecimentos**

Agradeço ao Prof. Bizarro a orientação oficial, e ao Prof. Vilela Mendes a orientação oficiosa.

Quero ainda agradecer o laboratório de ideias que me foi oferecido por cada pessoa com quem pude discutir o que estudei.



## Resumo

O estudo tradicional de plasmas, motivado por aplicações em fusão nuclear e tecnologias espaciais, é feito em regimes de altas temperaturas e baixas densidades, onde não se esperam efeitos quânticos. Avanços recentes na manipulação atômica de materiais tornam relevantes a generalização da teoria cinética clássica para o caso quântico, não só do ponto de vista teórico. As propriedades das equações cinéticas de plasmas permitem quantizá-las por deformação. Obtêm-se ansätze quânticos para a equação de Boltzmann para um gás de esferas rígidas e para os sistemas de Maxwell-Vlasov e Poisson-Vlasov. Os resultados para Maxwell-Vlasov e Boltzmann são originais.

**Palavras-chave** Teoria cinética, Plasmas quânticos, Teoria das deformações, equação de Boltzmann quântica, Equação de Vlasov quântica





## Abstract

The traditional applications of plasma physics has mainly focused on high temperature / low-density plasmas, making quantum effects irrelevant. Even in plasmas with quantum effects present, its expected that the deviations to the classical theory are small. The structure of kinetic models are amenable to the application of this theory, resulting in motivated ansätze for the quantum analogues. Quantum ansätze for the kinetic equations are obtained, in the cases of the Boltzmann equation for a gas of rigid spheres, the Maxwell-Vlasov and Poisson-Vlasov systems. The results for Maxwell-Vlasov and Boltzmann are new.

**Keywords** Kinetic Theory, Quantum plasmas, Theory of deformations, Quantum Boltzmann equation, Quantum Vlasov equation



# Conteúdo

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1.1	Motivação	1
1.2	Objectivos	2
1.3	Trabalho original	2
1.4	Estrutura	2
<b>2</b>	<b>Sistemas Físicos</b>	<b>3</b>
2.1	Linguagem	3
2.2	Física Estatística Clássica	10
2.2.1	Representação de uma população	11
2.2.2	Princípio da Equiprobabilidade e Sistemas Ergódicos	13
2.2.3	Sistemas Hamiltonianos	14
<b>3</b>	<b>Teoria das Deformações</b>	<b>17</b>
3.1	Introdução	17
3.2	Mecânica Quântica no espaço de Fases	18
3.2.1	Produto de Moyal	22
3.3	Deformações	25
3.3.1	Deformações formais de Álgebras	25
3.4	Deformação de variedades de Poisson	26
<b>4</b>	<b>Equações Cinéticas</b>	<b>31</b>
4.1	Plasmas	31
4.2	Plasma Electromagnético	33
4.2.1	Sistema de Klimontovich	33
4.2.2	Molificação	35
4.2.3	Ensemble Electromagnético	36
4.3	Plasma Hamiltoniano	40
4.3.1	Hierarquia Bogoliubov–Born–Green–Kirkwood–Yvon (BBGKY)	41
4.4	Maxwell-Vlasov	44
4.5	Poisson-Vlasov	48
4.6	Boltzmann	48
4.6.1	Introdução	48
4.6.2	Colisões elásticas	49
4.6.3	Derivação da equação de Boltzmann para esferas rígidas	51
4.6.4	Boltzmann e BBGKY	57
4.6.5	Boltzmann e Stosszahlansätze	58
<b>5</b>	<b>Equações Cinéticas Quânticas</b>	<b>59</b>
5.1	Deformações ingénuas	59
5.2	Poisson-Vlasov	61
5.3	Maxwell-Vlasov	62
5.4	Boltzmann	64



# Lista de Tabelas

3.1	componentes das 3 teorias físicas. $\mathcal{L}(V)$ é o espaço linear de operadores de $V$ . . . . .	17
3.2	Objectivo da prescrição de Weyl. . . . .	18
3.3	Elementos de Mecânica Quântica de Wigner (MQW), resultado da prescrição de Weyl. . . . .	22



# Lista de Figuras

3.1	relações entre as teorias físicas . . . . .	18
4.1	Ilustração da conservação de energia e de momento numa colisão elástica. As linhas a azul são os momentos iniciais, as linhas a encarnado os momentos finais. O círculo a preto representa a conservação da energia cinética. O círculo maior ilustra que quando $m_1 = m_2$ , o efeito da colisão é uma rotação do momento relativo. . . . .	50





# Acrónimos

**BBGKY** Bogoliubov–Born–Green–Kirkwood–Yvon. 37, 47, 63, 70

**EM** Campos ElectroMagnéticos. 5, 37, 38

**MC** Mecânica Clássica. 10, 11, 23, 33

**MCE** Mecânica Clássica Estatística. 6, 11, 16, 23, 24, 31

**MQ** Mecânica Quântica. 31, 33

**MQS** Mecânica Quântica de Schrödinger. 5, 10, 23, 24, 27, 28, 35

**MQW** Mecânica Quântica de Wigner. 5, 6, 23, 24, 27, 28, 31, 35



# Introdução

## 1.1 Motivação

Um plasma é uma multidão de partículas a interagirem com o campo electromagnético e com um potencial colisional. Pertence ao domínio típico de aplicação da física estatística, onde se tenta, para sistemas físicos de grande complexidade, fornecer estimativas para a evolução de observáveis macroscópicos. As equações cinéticas servem para estudar a evolução do observável função de distribuição, que é a densidade de partículas com velocidade  $v$  e posição  $x$ . Quando a interacção com os **Campos Electromagnéticos (EM)** médios é dominante, obtém-se a equação de Vlasov. Acoplada às equações de Maxwell, define o sistema Maxwell-Vlasov. Chama-se Poisson-Vlasov ao caso electrostático.

Quando as trajectórias de interesse são colisionais, no sentido de serem uma sucessão de movimentos livres separados por interacções intensas e de curta duração, resulta a equação de Boltzmann[1]. O protótipo é um gás de esferas rígidas com colisões elásticas. Mostra-se que é possível modelar este caso como um caso limite de um gás Hamiltoniano, com um potencial colisional contínuo.

Os regimes em que tradicionalmente se estudam os plasmas, a temperaturas elevadas e com gases rarefeitos, tornam irrelevantes possíveis efeitos quânticos[2]. Em particular, não há na literatura uma versão consensual da versão quantizada da equação de Boltzmann[2]. Mesmo em aplicações de matéria condensada, a maior parte dos efeitos quânticos resultam da presença da rede cristalina de iões[2]. Avanços recentes na manipulação atómica de estruturas metálicas permitem criar materiais em que a aproximação de rede cristalina infinita desaparece. Nesse caso, os efeitos quânticos no plasma de electrões tornam-se relevantes [2].

Do ponto de vista da teoria das deformações, modelos quânticos são deformações dos modelos clássicos. Intuitivamente, uma deformação é uma versão alterada, mas de alguma forma semelhante, ao objecto deformado. A dose da deformação é controlada por um parâmetro formal, de tal forma que as quantidades deformadas são explicitamente desenvolvidas numa série de potências. No caso da transição clássica/quântica, este parâmetro é identificado com a constante de Planck,  $\hbar$ , e os objectos deformados são o produto associativo de observáveis e o parêntesis de Poisson. O produto de Moyal é o resultado central. Foi obtido por Moyal, numa tentativa de converter a **Mecânica Quântica de Schrödinger (MQS)** numa versão equivalente em que os observáveis fossem funções no espaço de fases clássico, a que se chama **MQW**. As transformações de Wigner e de Moyal[3] mostram que as duas versões são equivalentes.

O produto de Moyal sugere que a mecânica clássica Hamiltoniana estatística é o termo de ordem 0 da mecânica quântica[4]. A teoria das deformações procura fazer o caminho inverso: dada a mecânica clássica, será possível motivar a quântica? No caso típico de um sistema clássico de uma partícula Hamiltoniana com espaço de fases  $\mathbb{R}^6$ , não só a resposta é positiva, como é única, a menos de condições com fundamentação física, e coincide com a de Moyal. Em sistemas com um espaço de fases mais complexo é possível deformar, mas perde-se a unicidade[5].

Noções como o espectro de observáveis, colapso de função de onda, etc, têm toda representação nos sistemas deformados [4, 6]. Assim, a teoria das deformações é capaz de gerar sistemas quânticos, sem necessitar da ponte com a mecânica quântica típica. Trata-se portanto de uma generalização[7].

Na teoria de Kontsevitch, os objectos típicos a deformar são as variedades de Poisson de dimensão finita[5]. Verifica-se que a física estatística clássica e as equações cinéticas são exemplos de variedades de Poisson, mas de dimensão infinita. Os parêntesis de Poisson são construídos usando o parêntesis

de Poisson de uma partícula. Argumenta-se que a deformação ingênua do caso infinito, substituindo o parêntesis e o produto clássicos pelos de Moyal, resulta em ansätze motivados para as versões quânticas das equações cinéticas.

## 1.2 Objectivos

Usar a teoria das deformações como guia na construção de modelos quânticos para as equações cinéticas em plasmas.

## 1.3 Trabalho original

O sistema Poisson-Vlasov quântico é conhecido e encontra-se em [8]. De qualquer forma, a derivação apresentada é original. Os resultados originais são o sistema de Maxwell-Vlasov quântico 5.61 e a equação de Boltzmann para esferas rígidas quântica 5.82.

## 1.4 Estrutura

O primeiro capítulo introduz a noção de sistemas físicos clássicos e quânticos. Utilizando a linguagem da geometria diferencial, mostra-se que se pode generalizar o conceito de sistema físico Hamiltoniano para um sistema de Poisson[9], que será utilizado pela teoria das deformações. Discute-se de passagem a motivação para a **Mecânica Clássica Estatística (MCE)** e a natureza da lei de conservação de probabilidade no espaço de fases.

No segundo capítulo introduzem-se os conceitos mínimos para entender a quantização por deformação. Começa-se por discutir a **MQW**[10], o primeiro resultado que põe em evidência a semelhança entre a mecânica clássica e quântica. Introduzem-se deformações de álgebras para poder compreender a noção de quantização por deformação de sistemas de Poisson[5].

No terceiro capítulo analisam-se as equações cinéticas e as estruturas de Poisson capazes de as gerar. [11]. Discutem-se separadamente os sistemas de Maxwell-Vlasov, Poisson-Vlasov e a equação de Boltzmann para esferas rígidas.

No quarto capítulo faz-se a quantização das estruturas de Poisson associadas às equações cinéticas, motivada pela teoria das deformações.

# Sistemas Físicos

## 2.1 Linguagem

Define-se o que se entende por sistemas físicos e teorias físicas, e algumas das ferramentas matemáticas necessárias para construir as suas representação matemáticas. Este capítulo é essencialmente um repositório de definições. O primeiro objectivo é encontrar uma definição de *sistema físico*, que possa ser usada para estudar tanto sistemas clássicos como sistemas quânticos. A discussão que inspirou parte das definições encontra-se em [12]. As definições apresentadas são originais na forma mas não no conteúdo. O segundo objectivo é definir *sistema de Poisson*, generalização de sistemas Hamiltonianos, para poder usar a linguagem de Kontsevich [5] na secção dedicada à teoria das deformações.

**Definição 2.1** (Sistema Dinâmico  $(\Omega, \phi)$ ). Seja  $\Gamma = \{\gamma\}$ , um conjunto de curvas  $\gamma : \mathbb{R} \rightarrow A$  num espaço  $A$ . Define-se a *órbita* de  $\gamma$  como  $G(\gamma) = \{a \in A : \exists t \text{ t.q. } \gamma(t) = a\}$ . Seja  $G(\Gamma)$  o conjunto de todas as órbitas dos elementos de  $\Gamma$ . Define-se o conjunto

$$\Omega = \bigcup G(\Gamma) \quad , \quad (2.2)$$

a união das órbitas de todas as trajectórias. Se for possível definir  $\phi_t : \Omega \rightarrow \Omega, \forall t$  tal que

$$\phi_t(\gamma(t_0)) = \gamma(t_0 + t) \quad , \quad \forall t_0, t, \gamma \quad , \quad (2.3)$$

Então chama-se a  $(\Omega, \phi)$  **sistema dinâmico** (determinístico), com **espaço de fases**  $\Omega$  e **dinâmica**  $\phi$ . Às curvas  $\gamma$  chama-se **trajectórias**.

A utilidade desta definição vem de dar o papel central às trajectórias.

**Nota 2.4. IMPORTANTE** *Em rigor, não se prova que os sistemas estudados são sistemas dinâmicos. Seria necessário mostrar que as curvas integrais dos sistemas diferenciais estão bem definidas  $\forall t$ , o que não é trivial no caso geral. De um ponto de vista físico, espera-se que sejam poucas as curvas integrais patológicas. Um exemplo seria um par de electrões em interacção electrostática. Não existe nenhuma trajectória que atravesse os pontos em que as duas partículas ocupam a mesma posição,  $x_1 = x_2$ . No entanto, o volume no espaço de fases ocupado pela região patológica é 0.*

**Exemplo 2.5.** A evolução de um sistema quântico Hamiltoniano é dada pela aplicação do operador  $\exp(-\frac{itH}{\hbar})$  a um estado inicial. Se se fizer  $\phi_t = \exp(-\frac{itH}{\hbar})$ , obtém-se um sistema dinâmico (assumindo a convergência da exponencial  $\forall t$ ).

Uma teoria física é uma ferramenta para calcular valores de *medições de grandezas físicas*, associadas a *fenómenos físicos*. Deste ponto de vista, a definição de sistema dinâmico não é suficiente para se poder definir uma representação matemática de um fenómeno físico. É preciso acrescentar a representação das grandezas físicas e da noção de medição.

**Definição 2.6** (Sistema observável/físico). Seja  $(\Omega, \phi)$  um sistema dinâmico. Considere-se um conjunto  $N$  de **observáveis** e uma operação

$$\begin{aligned} \mathcal{O} : N \times \Omega &\rightarrow \mathbb{R} \\ (n, x) &\mapsto \langle n \rangle_x \end{aligned} \quad (2.7)$$

A  $\langle n \rangle_x$  chama-se observação no estado  $x$  do observável  $n$ . Chama-se a  $(\Omega, \phi, N, \mathcal{O})$  **sistema observável** ou físico.

Os observáveis serão a representação numa dada teoria das grandezas físicas de interesse, e a forma de fazer previsões sobre as medições é dada pela observação  $\mathcal{O}$ .

O estado não é necessariamente um dos observáveis. Mesmo no caso clássico, esta observação é importante. Num sistema físico estatístico, o estado passa a ser dado por uma densidade de probabilidade no espaço de fases. Os observáveis são os mesmos do sistema não estatístico associado. A observação  $\mathcal{O}$  é o valor esperado, usando o estado como densidade de probabilidade. O estado não é um observável: não existe nenhuma grandeza física que lhe esteja associada.

Um sistema clássico é um sistema físico com os seguintes elementos:

- O espaço de fases  $\Omega$  é uma variedade suave;
- Os observáveis são funções suaves do espaço de fases;
- A observação é dada por  $\langle n \rangle_x = n(x)$ .

Um sistema quântico na formulação de Schrödinger é um sistema físico com os seguintes elementos:

- $\Omega = \{|\psi\rangle \in V : \langle \psi | \psi \rangle = 1\}$ , onde  $V$  é um espaço de Hilbert;
- $N(\Omega) = \{A \in \mathcal{L}(V) : A^\dagger = A\}$ ,  $\mathcal{L}(V)$  espaço de operadores lineares de  $V$  ;
- $\langle A \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \psi | A | \psi \rangle$ .

**Nota 2.8.** *A mecânica quântica tem capacidade para uma definição de observação mais detalhada. Nomeadamente, permite captar completamente a função de distribuição da variável aleatória "resultado da medição do observável  $A$  no estado  $|\psi\rangle$ ". Na definição acima, a observação é definida como o valor esperado desta distribuição. Neste trabalho, não é necessário utilizar a definição mais completa. Deste ponto de vista, a mecânica quântica é um sistema dinâmico determinístico.*

**Definição 2.9** (Teorias físicas). Considere-se um conjunto de sistemas físicos, parametrizável por um número de escolhas. Chama-se a este conjunto uma **teoria física**.

**Exemplo 2.10.** Teorias físicas:

- **Mecânica Clássica (MC)**: conjunto de sistemas clássicos, a menos da escolha das forças;
- **MQS**: conjunto de sistemas quânticos, a menos da escolha do operador  $H$ .

A representação matemática de um fenómeno físico tem uma dose grande de arbitrariedade. O que é absoluto, e difícil de definir matematicamente, são as grandezas físicas e a noção de medição. Fixe-se um fenómeno. Para uma grandeza física fixa, a observação deve ser invariante sobre todas as representações e coincidir com o valor da medição. O significado físico de uma teoria está no mapa que estabelece a relação entre grandezas físicas e observáveis, feito de tal forma que a noção de observação coincida com a noção de medição.

Se dois sistemas físicos representam um mesmo fenómeno, deve existir uma tradução que permita, pelo menos num sentido, obter os resultados num sistema partindo do resultados no outro.

**Definição 2.11** (Representação fiel). Seja um sistema físico  $(\Omega, N, \phi)$ . Seja  $(\Omega', N', \phi')$  um sistema que respeite:

$$T : \Omega \rightarrow \Omega' \quad (2.12)$$

$$\Omega' = \{T(x), \forall x \in \Omega\} \quad (2.13)$$

Considere-se os observáveis  $n \in N$  tal que

$$T(x) = T(x_1) \implies \langle n \rangle_x = \langle n \rangle_{x_1} \quad . \quad (2.14)$$

Chama-se  $N_T$  ao conjunto destes observáveis. Os observáveis em  $N'$  respeitam a tradução, ou seja,

$$N' = \left\{ n' : \exists n \in N_T \text{ t.q. } \langle n' \rangle_{T(x)} = \langle n \rangle_x \forall x \in \Omega \right\} \quad . \quad (2.15)$$

A dinâmica comuta com a tradução  $T$ , ou seja respeita:

$$\phi' \circ T = T \circ \phi \quad . \quad (2.16)$$

Diz-se que  $(\Omega', N', \phi')$  define uma **representação fiel** de  $(\Omega, N, \phi)$ . Caso  $T$  seja invertível, diz-se uma **representação completa**.

Se a tradução for uma operação única sobre uma teoria física  $\mathcal{A}$ , diz-se **tradução canónica da teoria  $\mathcal{A}$** . Nesse caso, fala-se de representações fieis e completas de teorias.

**Exemplo 2.17.** Considere-se um sistema físico, em que as trajectórias são as curvas integrais de um certo campo vectorial, e os observáveis são funções no espaço de fases. Define-se uma representação completa do mesmo fenómeno substituindo o estado  $x_0$  pela densidade de probabilidade.  $f_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$ . A tradução  $x_0 \rightarrow f_{x_0}$  é claramente invertível. Os restantes elementos são definidos de forma a tornar a representação motivada por  $T$  fiel. Esta representação é um caso particular de um sistema físico estatístico, que será definido mais à frente.  $T$  pode ser aplicado a qualquer sistema físico clássico, sem precisar de especificar a forma exacta do sistema. Deste modo, o conjunto das traduções de todos os sistemas estudados em **MC**,  $T(\text{MC})$ , está bem definido como uma aplicação entre teorias e  $T(\text{MC}) \subset \text{MCE}$ .  $T$  é um portanto uma tradução canónica.

**Exemplo 2.18.** As leis de Newton motivam representações para muitos fenómenos físicos. Considere-se uma partícula sobre a acção de uma força. A representação motivada pelas leis de Newton resulta na dinâmica dada pelas curvas integrais do sistema diferencial

$$m \frac{d^2}{dt^2} x = \partial_t^2 x = F(x, t) \quad , \quad (2.19)$$

onde  $x$  são as coordenadas cartesianas do sistema num referencial inercial. Trata-se de uma equação diferencial de 2ª ordem em  $\mathbb{R}^3$ . Sabe-se que as soluções deste sistema podem ser etiquetadas pelo par  $(x(t_0), v(t_0))$ , para um  $t_0$  qualquer. Faz portanto sentido olhar para um novo espaço, neste caso  $\mathbb{R}^{3+3}$ , que é o produto cartesiano do espaço das posições e do espaço das velocidades. As trajectórias, curvas integrais do sistema diferencial, definem um sistema dinâmico determinístico: são uma partição do espaço em que vivem e são completas (no caso geral não tem que ser verdade. Prova-se mais à frente que é verdade nos casos típicos). Este espaço tem a dimensão necessária e suficiente para que isto seja verdade. Em comparação, o espaço das posições não tem estas propriedades: dada uma certa posição, existe uma família de trajectórias que a atravessam, uma por cada velocidade inicial.

No caso em que a força é dada por  $F = -d\mathcal{V}$ , onde  $d$  é o gradiente usual, prova-se que existe

uma função  $\mathcal{H}$  que é uma constante de movimento.

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \frac{1}{2}mv \cdot v + \mathcal{V} \iff \\ \partial_t \mathcal{H} &= mv \cdot \partial_t v + v \cdot d\mathcal{V} \\ &= v \cdot (m\partial_t v - F) = 0 \quad .\end{aligned}\tag{2.20}$$

A função  $\mathcal{H}$  tem como conjunto de partida o espaço de fases, e pode ser usado para reescrever a dinâmica directamente no espaço  $(x, v)$ . Para isso, é preciso conseguir equações para calcular a evolução de qualquer estado. A partir das equação de Newton, tira-se directamente  $(\partial_t x, \partial_t v)$ :

$$\begin{aligned}\partial_t x &= v = \partial_v \mathcal{H} / m \\ \partial_t v &= F/m = -\partial_x \mathcal{H} / m\end{aligned}\tag{2.21}$$

Faz-se a transformação motivada por  $v \rightarrow p/m$ ,  $(x, v) \rightarrow (x, p)$ . A massa desaparece do lado direito nas duas equações e o resultado é:

$$\begin{aligned}\partial_t x &= \partial_p \mathcal{H} \\ \partial_t p &= -\partial_x \mathcal{H}\end{aligned}\tag{2.22}$$

, que podem ser rescritas como

$$\partial_t z = X_{\mathcal{H}} \cdot \Lambda \cdot d\mathcal{H}, \quad \Lambda = \begin{bmatrix} 0 & \mathbb{1} \\ -\mathbb{1} & 0 \end{bmatrix} \quad .\tag{2.23}$$

À representação obtida chama-se *Hamiltoniana*.

Pode-se utilizar para o espaço de fases objectos com uma estrutura diferente de  $\mathbb{R}^n$ . Nomeadamente, pode-se considerar sistemas em que o espaço de fases é dado por uma variedade suave de  $\mathbb{R}^n$ . Utilizando a linguagem da geometria diferencial, tanto a noção de sistemas Hamiltonianos como a de parêntesis de Poisson se generalizam, exigindo da variedade algumas propriedades adicionais. Mais à frente, ver-se-á que a teoria das deformações aplica-se a sistemas muito mais gerais do que o caso típico dos sistemas Hamiltonianos com  $\Omega = \mathbb{R}^n$ . Assim, justifica-se a presença das seguintes definições neste trabalho. Em qualquer das referências[9, 13, 14, 15] encontra-se um estudo detalhado.

Os elementos centrais da geometria diferencial são as definições de *variedades suaves* e de *vector*. Uma variedade  $\Omega$  é um conjunto com uma noção de vizinhança e que, para todas as vizinhanças suficientemente pequenas, é isomorfo a  $\mathbb{R}^n$ . Uma variedade suave é uma especialização. Associa-se à variedade um conjunto de mapas, a que se chama Atlas. Dois mapas diferentes resultam em representações diferentes de uma certa vizinhança. Se for feita suficientemente pequena, a correspondência entre as duas representações deve ser uma função  $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  infinitamente diferenciável. Isto deve ser verdade sempre que dois mapas estão definidos sobre a mesma vizinhança. O atlas deve cobrir toda a variedade. Ou seja, para qualquer região deve sempre existir um par de mapas aplicáveis.

Uma função  $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^m$  diz-se suave se as suas representações motivadas pelo atlas são funções  $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$  infinitamente diferenciáveis. Analogamente para funções  $\mathbb{R}^m \rightarrow \Omega$ . Fazendo  $m = 1$ , tem-se a definição de curvas suaves.

Um vector é a representação da noção intuitiva de um movimento infinitesimal. É definido de forma a mimetizar a ideia física de velocidade. A noção intuitiva da velocidade, esquecida graças ao hábito de pensar no espaço real como  $\mathbb{R}^3$ , está directamente relacionada com a noção de curva. Se alguém percorrer uma curva e for registando os valores de uma função  $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  ao longo da viagem, fica com uma noção da velocidade da curva em cada ponto, observando a forma como varia  $f$ . Claro está que se  $f$  for constante qualquer movimento, por mais veloz que seja, resulta no registo do mesmo valor. Imagine-se agora que o observador tinha acesso a qualquer função suave do espaço. Desta forma, conseguiria definir a noção de velocidade para qualquer curva. A velocidade  $X$  de uma certa curva  $\gamma$  no que passe no ponto  $x$  para  $t = 0$  é um operador do espaço das funções suaves, que retorna a derivada material(a que se chama *derivada de Lie*) de qualquer função  $f$  ao longo de  $\gamma$  no ponto  $x$ .

$$\begin{aligned}X^\gamma &: C^\infty \rightarrow \mathbb{R} \\ X^\gamma(f) &= (f \circ \gamma)'(0) = df(X)\end{aligned}\tag{2.24}$$

O "milagre"que torna a geometria diferencial interessante, é que estas velocidades definem um espaço



vectorial em cada ponto  $x$ , com dimensão igual à da variedade suave. Este espaço é gerado considerando todas as velocidades possíveis em  $x$ , variando a curva  $\gamma$ . Note-se que não há referência nenhuma à escolha de coordenadas na definição do vector.

A notação  $df(X)$  sugere que se pode inverter o papel de  $X$  e de  $f$ .  $df$ , o diferencial de  $f$ , é definido de forma a verificar a equação acima. Por ser uma operação linear do espaço das velocidades, diz-se um covector. Pode-se generalizar a noção de covector e de vector, definindo um tensor de ordem  $(n, m)$ : é um operador multilinear de  $n$  cópias do espaço de velocidades e de  $m$  cópias do espaço dos diferenciais. um tensor  $(1, 0)$  é um covector e um tensor  $(0, 1)$  é um vector. Existem duas classes de tensores especiais, a que se chamam  $n$ -formas e  $n$ -vectores. São tensores antisimétricos de ordem  $(n, 0)$  e  $(0, n)$ , respectivamente. A noção de campo vectorial suave é um pouco mais sofisticada. Intuitivamente, é a atribuição a cada ponto de um vector, feita de forma suave (ver "section" e "Tangent Bundle" [13]). Da mesma forma, define-se um campo tensorial.

Existe uma definição de integração de  $n$ -formas. Intuitivamente, é a soma sobre a zona de integração da contracção do campo tensorial da  $n$ -forma com um campo tensorial de um  $n$ -vector específico da zona de integração. A integração de formas permite obter uma generalização do teorema fundamental do cálculo [16], a que se chama teorema de Stokes (generalizado) [13]. Tem como casos particulares o teorema de Gauss e o teorema de Stokes usual. As  $n$ -formas com  $n$  igual à dimensão da variedade, permitem generalizar a integração de funções sobre variedade reais. A partir destas formas, define-se uma densidade fixando uma orientação para a variedade. Esta densidade define uma medida  $\mu$  sobre a variedade, que é o elemento chave para se poder definir a integração de funções.

**Nota 2.25.** *Todas estas definições são independentes de escolhas de coordenadas.*

Feita esta introdução, salta-se para as definições mais avançadas utilizadas no trabalho.

**Definição 2.26** (Variedade Simplética). Seja  $M$  uma variedade suave de dimensão  $2n$ . Se existir uma forma diferencial  $w$  de grau 2 tal que

$$dw = 0 \quad (w \text{ fechada}) \quad (2.27)$$

$$w(X, Y) = 0, \forall X \implies Y = 0 \quad (w \text{ não-degenerada}) \quad (2.28)$$

diz-se que  $w$  é uma forma simplética e que  $(M, w)$  é uma **variedade simplética**.

Caso o espaço de fases seja uma variedade simplética, é possível definir um campo vectorial Hamiltoniano, com equações de movimento com propriedades que generalizam as das equações de Hamilton.

**Definição 2.29** (campo vectorial Hamiltoniano). Seja  $(M, w)$  uma variedade simplética. Define-se o **campo vectorial Hamiltoniano**  $X_{\mathcal{H}}$  do **Hamiltoniano**  $\mathcal{H} : M \rightarrow \mathbb{R}$  por

$$X_{\mathcal{H}} : \quad d\mathcal{H} = w(X_{\mathcal{H}}, \bullet) \quad (2.30)$$

Pode-se utilizar um bi-vector (2-vector)  $\Lambda$  tal que

$$w(X_{\mathcal{H}}, X_f) = \Lambda(d\mathcal{H}, df) \quad (2.31)$$

Ao bi-vector  $\Lambda$  chama-se **parêntesis de Poisson simplético**.

Nesse caso, tem-se a equação para a variação material de qualquer observável  $A$ :

$$\partial_t A = \{A, \mathcal{H}\} \quad (2.32)$$

**Definição 2.33** (Sistema Hamiltoniano). Seja  $(M, w)$  uma variedade simplética. Seja  $\mathcal{H}$  tal que as curvas integrais  $X_{\mathcal{H}}$  definem um sistema dinâmico em  $M$ . Chama-se a  $(M, w, \mathcal{H})$  **sistema Hamiltoniano**.

**Exemplo 2.34** (Continuação do exemplo 2.18).

$$\{A, B\} = dA \cdot \Lambda \cdot dB \quad (2.35)$$

é um exemplo de parêntesis de Poisson simplético. As propriedades da matriz  $\Lambda$  que permitem concluir que a definição é verificada são

$$\Lambda = -\Lambda^\top \quad (2.36)$$

$$\Lambda \cdot \Lambda^\top = \mathbb{1} \quad (2.37)$$

$$|\Lambda| = 1 \quad (2.38)$$

Como a matriz  $\Lambda$  é invertível, a função Hamiltoniana é única, a menos de uma função "ortogonal" a d:

$$\partial_t z = \Lambda \cdot d\mathcal{H} = \Lambda \cdot d\Phi \implies d(\mathcal{H} - \Phi) = 0 \quad (2.39)$$

**Proposição 2.40.** *Se as curvas de nível de  $\mathcal{H}$  forem compactas, então as curvas integrais de  $X_{\mathcal{H}}$  definem um sistema dinâmico.*

*Demonstração.* A função  $\mathcal{H}$  é uma constante de movimento, porque

$$X_{\mathcal{H}}(\mathcal{H}) = w(X_{\mathcal{H}}, X_{\mathcal{H}}) = 0 \quad (2.41)$$

As trajetórias são curvas integrais de um campo vectorial sobre as curvas de nível de  $\mathcal{H}$ , que são variedades compactas, por hipótese. Qualquer campo vectorial sobre uma variedade compacta é completo, logo as curvas integrais de  $X_{\mathcal{H}}$  estão definidas  $\forall t$ . □

As propriedades do parêntesis de Poisson simplético são suficientemente úteis para generalizar de novo a noção de campo vectorial Hamiltoniano [9, 14]. Define-se um novo objecto, em que se exige apenas a existência de um Parêntesis de Poisson, que pode ou não resultar de uma forma simplética.

**Definição 2.42** (Variedade de Poisson). Seja  $\Omega$  uma variedade suave equipada com a operação  $\{\bullet, \bullet\} : F(\Omega) \times F(\Omega) \rightarrow F(\Omega)$ , tal que

$$\{x, y\} = -\{y, x\} \quad (\text{anti-simetria}) \quad (2.43)$$

$$\{\{x, y\}, z\} + \{\{y, z\}, x\} + \{\{z, x\}, y\} = 0 \quad (\text{Identidade de Jacobi}) \quad (2.44)$$

$$\{x, \{y, z\}\} = y \cdot \{x, z\} + \{x, y\} \cdot z \quad (\text{Identidade de Leibniz}) \quad (2.45)$$

Se  $\{\cdot, \cdot\}$  não for identicamente 0, então chama-se a  $(\Omega, \{\cdot, \cdot\})$  **variedade(ou estrutura) de Poisson**.

**Definição 2.46** (Sistema de Poisson). Seja um sistema dinâmico  $(\Omega, \phi)$  que é simultaneamente uma variedade de Poisson  $(\Omega, \{\cdot, \cdot\})$ . Se as trajetórias implicarem que

$$\partial_t A = \{A, H\} \quad (2.47)$$

para qualquer observável  $A$ , então chama-se a  $(\Omega, \{\cdot, \cdot\}, H)$  **Sistema de Poisson** de Hamiltoniano  $\mathcal{H}$ .

**Exemplo 2.48.** Considere-se um corpo rígido em movimento livre, de momento angular  $\Pi$ . O estado do sistema é o momento angular. Os observáveis são quaisquer funções suaves do momento angular. A observação é a aplicação do observável ao estado. As equações de movimento podem ser escritas na forma

$$\partial_t F(\Pi) = \{F, H\}_{RB} := \Pi \cdot \nabla F \times \nabla H \quad (2.49)$$

com

$$H(\Pi) = \frac{1}{2} \Pi \quad . \quad (2.50)$$

$\{F, H\}_{RB}$  é um parêntesis de Poisson[14].

Existem sistemas físicos que são sistemas de Poisson com espaço de fases de dimensão infinita[11, 14]. Por exemplo, o estado pode ser dado uma densidade de probabilidade[16] e os parêntesis de Poisson construídos utilizando derivadas funcionais.

**Definição 2.51** (Derivadas funcionais). Seja  $H : M \rightarrow \mathbb{R}$  um funcional de um conjunto de densidades  $M$  definidas sobre  $\Gamma$ .

Considere-se um deslocamento  $\delta\mu$  em  $M$ . Chama-se a

$$d_\mu H[\delta\mu] = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{H(\mu + t\delta\mu) - H(\mu)}{t} \quad (2.52)$$

derivada direccional de  $H$  na direcção  $\delta\mu$ , no ponto base  $\mu$ . Se existir uma função  $g : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$  tal que  $\forall \delta\mu$

$$d_\mu H[\delta\mu] = \int_\Gamma g \delta\mu \quad , \quad (2.53)$$

diz-se que  $H$  é **diferenciável**, e define-se  $d_\mu H = g$ . A  $dH$  chama-se **diferencial de  $H$** .

Assume-se agora que  $M = \{\mu : \mu = f \mu^e\}$ , para uma densidade  $\mu^e$  fixa. Define-se

$$\partial_f H = \mu^e d_\mu H \quad . \quad (2.54)$$

**Nota 2.55.** Neste trabalho, confunde-se  $d_\mu H$  com  $\partial_f H$ . Para os sistemas estudados, a diferença entre as duas definições é irrelevante. De qualquer forma, é um abuso de linguagem. Por exemplo, o gradiente é um operador de funções, tais como  $d_\mu H$ , não podendo ser aplicado a densidades, como  $\partial_f H$ . No entanto, é mais natural escrever  $\partial_f f$  do que  $d_\mu f$ .

**Exemplo 2.56.** Quando  $\Omega = \mathbb{R}^n$ , pode-se escolher  $\mu^e = dx_1 \dots dx_n$ . Neste caso, pode-se obter  $d_\mu H$  de  $\partial_f H$ , fazendo

$$d_\mu H = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\int_{V_r(x)} \partial_f H}{\int_{V_r(x)} \mu^e} \quad , \quad (2.57)$$

em que  $V_r(x)$  é uma bola centrada em  $x$  de raio  $r$ .

Se  $H(\mu)$  for da forma  $\int_\Omega g \mu$ , então  $d_\mu H = g$  e  $\partial_f H = g dx_1 \dots dx_n$ .

A forma intuitiva de pensar nestas derivadas é ver  $f$  como vector num espaço vectorial de dimensão  $n$  com  $n \rightarrow \infty$ , com coordenadas  $f_x = f(x)$ . As densidades definem aplicações lineares  $F \rightarrow \mathbb{R}$ , em que a actuação é definida por

$$\mu(f) = \int_\Omega f \mu \quad . \quad (2.58)$$

São portanto covectores do espaço de funções. O papel da densidade  $\mu^e$  é semelhante ao da métrica: permite definir um produto interno entre vectores  $f$  e  $g$ .

$$\langle f, g \rangle := \int_\Omega f g \mu^e \quad (2.59)$$

Tendo uma métrica definida, pode-se sempre converter um vector num covector, tal como se faz quando se transformou  $d_\mu H$  em  $\partial_f H$ . Em geral, não é possível fazer a transformação no sentido contrário, como feito no exemplo acima.

**Definição 2.60** (medida canónica  $\mu^c$ ). Seja  $\Omega = \mathbb{R}^n$ . A medida canónica  $\mu^c$  é

$$\mu^c(V) = \int_V dz = \int_V dz_1 \dots dz_n \quad , \quad (2.61)$$

onde  $(z_1, \dots, z_n)$  é são as coordenadas cartesianas de  $\Omega$ .

**Definição 2.62** (Delta de Dirac). Considere-se o operador identidade, claramente linear, num espaço de funções de  $\Omega$ . Se existir uma medida  $\mathbb{1}(z)\mu^e$  tal que

$$f(z) = \int_{\Omega} f \mathbb{1}(z) \mu^e \quad (2.63)$$

chama-se a  $\mathbb{1}(z)$  distribuição (função) **delta de Dirac**. Usa-se a notação  $\mathbb{1}(z)(z_0)$  para representar  $\delta(z - z_0)$ . Estende-se a notação  $\langle \cdot, \cdot \rangle$ , para poder escrever

$$\begin{aligned} \mathbb{1}[f] = f &= \langle \mathbb{1}, f \rangle \\ &\iff \\ f(z) &= \langle \mathbb{1}(z), f \rangle \end{aligned} \quad (2.64)$$

## 2.2 Física Estatística Clássica (MCE)

Do ponto de vista experimental, é impossível conhecer exactamente o estado de um sistema físico clássico. Primeiro, porque existem sempre erros experimentais, e segundo, porque quando os erros experimentais se aproximam de zero o sistema deixa de ser clássico. Partindo de um estado inicial, os erros experimentais motivam a definição de uma densidade de probabilidade. O valor que se espera de uma medição física é dado pelo valor médio que resulta desta densidade. Conhecidas as medições num instante, pode-se querer conhecer a densidade de probabilidade num tempo futuro. Tendo em conta a natureza determinística dos sistemas físicos clássicos, assume-se que a probabilidade de uma região no instante  $t$  é igual à probabilidade que a região ocupava no instante inicial. Ou seja, assume-se a conservação da probabilidade. Desta forma, uma medida feita num instante é suficiente para definir uma densidade de probabilidade do estado do sistema para todo o futuro. Em particular, pode-se recuperar a teoria não estatística, no limite em que os erros experimentais são 0.

O estado deixa de ser definido por um ponto no espaço de fases e passa ser definido por uma densidade de probabilidade no espaço de fases, a que se chama *ensemble*. Para definir um ensemble, é necessária a noção matemática de *medida*. Intuitivamente, uma medida serve para definir a extensão de volumes subconjuntos de uma variedade. É necessária à definição de propriedades extensivas, tais como a probabilidade. Os sistemas Hamiltonianos têm associados uma medida, construída a partir da forma simplética [9]. A equação de Liouville é uma equação de continuidade, no caso em que a dinâmica é conservativa.

A física estatística é mais do que uma teoria de erros experimentais, podendo ser usada como forma de justificar a termodinâmica a partir da mecânica microscópica de sistemas com muitos graus de liberdade. Um exemplo típico é um gás. A escolha do ensemble adequado baseia-se no princípio da equiprobabilidade à priori dos microestados: dada alguma informação sobre o sistema, na forma de restrições a valores de observáveis, preenche-se o espaço de fases com uma densidade constante sobre todos os estados compatíveis com a informação parcial. A justificação do princípio é essencialmente pragmática [17].

Em alguns casos, é possível ir mais longe na justificação da escolha do ensemble. Caso se esteja interessado apenas em valores médios sobre todos os tempos, pode-se usar o teorema ergódico de Birkhoff para tentar identificar um ensemble capaz de representar exactamente qualquer média temporal, independentemente do estado inicial do sistema [18]. Caso exista um ensemble para o qual o sistema se diz ergódico, as médias temporais e as médias sobre esse ensemble coincidem. No entanto, é em geral difícil provar a ergodicidade.

Pode-se pensar na física estatística como uma generalização da física não estatística, já que a segunda é um caso particular da primeira. Desse ponto de vista, a equação fundamental é a equação de Liouville,

sendo que as equações de Hamilton resultam da idealização de um sistema para o qual faz sentido escolher um ensemble em que se pode medir o estado com erros experimentais tão pequenos quanto se queira. Ver-se-á no próximo capítulo que a mecânica quântica é semelhante à física clássica estatística de sistemas Hamiltonianos. Assim, este ponto de vista aproxima a teoria clássica da quântica.

Uma propriedade interessante da física estatística de sistemas Hamiltonianos é que as equações de movimento são dadas por uma generalização do parêntesis de Poisson, com o estado dado por uma densidade do espaço de fases. Os parêntesis constroem-se partindo dos parêntesis de Poisson canónicos.

### 2.2.1 Representação de uma população

A física estatística de um sistema faz-se escolhendo uma população de estados, a que se chama **ensemble**. De que forma pode ser representado? Uma forma é realizar uma colonização do espaço de fases, ou seja, definir  $\mu : \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{R}$ , em que  $\mathcal{V}$  é o conjunto de volumes que se querem mensuráveis. A  $\mu$  chama-se **medida**[16].

A noção de volume no espaço de fases está bem definida para muitos sistemas físicos, já que um sistema Hamiltoniano finito tem associada uma densidade canónica, construída a partir da forma simplética  $w$ [9]. Chama-se a essa densidade  $\mu^w$ , que é a densidade associada à forma de Liouville [9]. Define-se como volume de um subconjunto  $V$  no espaço de fases  $\mu^w(V)$ .

Em geral, fixa-se uma medida no espaço de fases  $\mu^e$  e escolhe-se para o espaço de estados estatístico

$$\mu = f \mu^e \quad , \quad (2.65)$$

em que  $f$  é uma função no espaço de fases. Usa-se a notação

$$\mu(g) = \int_{\Omega} g \mu \quad (2.66)$$

$$\mu(V) = \int_V \mu \quad , \quad (2.67)$$

onde  $g$  é uma função integrável e  $V$  é um volume mensurável. Ou seja, confunde-se propositadamente a noção de medida e de densidade, para simplificar a notação.

Usa-se ainda a convenção

$$\int_V \mu^e = \int_V \quad (2.68)$$

para evitar referir a medida  $\mu^e$ .

**Definição 2.69** (Sistema físico estatístico). Dado um sistema físico  $(\Omega, \phi, N, \mathcal{O})$ , define-se um novo sistema físico  $(M(\Omega), \phi^E, N, \mathcal{O}_E)$ , onde  $M(\Omega)$  é um espaço de densidades sobre  $\Omega$  da forma  $f \mu^e$ ,  $f$  uma função. A  $\mu \in M(\Omega)$  chama-se um **ensemble** do sistema.  $\mathcal{O}_E$  é definido como

$$\mathcal{O}_E(n, \mu) = \langle n \rangle_{\mu} = \left( \int_{\Omega} n \mu \right) \quad . \quad (2.70)$$

Dois ensembles  $\mu, \mu'$  dizem-se iguais se  $\langle n \rangle_{\mu} = \langle n \rangle_{\mu'}$ ,  $\forall n \in N$ .

A dinâmica do sistema estatístico  $\phi^E$  é

$$\phi_t^E(\mu^0)(\phi_t(V)) = \mu^0(V) \quad , \quad (2.71)$$

onde  $\phi_t(V) = \{\phi_t(x), x \in V\}$ .

Se

$$\forall t : \exists g \text{ t.q. } \mu_t = g \mu^e \quad , \quad (2.72)$$

chama-se a  $(\mu^e, \phi^E)$  **sistema estatístico** associado a  $(\Omega, \phi)$ .

**Nota 2.73.** Se a densidade  $\mu^e$  atribuir a qualquer aberto do espaço de fases um valor positivo, então as condições que aparecem na definição acima são satisfeitas.

**Nota 2.74.** Quando o espaço  $\Omega$  é  $\mathbb{R}^n$ , a escolha natural para  $\mu^e$  é a medida canónica  $\mu^c = dz$ .

A definição da evolução do ensemble  $\phi_t^E$  é equivalente a exigir a conservação de probabilidade no espaço de fases.

**Exemplo 2.75** (Ensemble Experimental). Considere-se um sistema físico com espaço de fases  $\mathbb{R}^n$ . Neste caso, usa-se para medida  $\mu^e$ , a medida canónica :  $\mu^e(V) = \int_V dz$ .

Imagine-se que se fez a medição do estado de um sistema clássico no instante  $t_0$ . A distribuição de probabilidade decorrente do erro experimental,  $f_{t_0}$ , caracteriza a variável aleatória "estado do sistema em  $t_0$ ,  $z(t_0)$ ". É um exemplo de ensemble,  $\mu_0 = f_{t_0}\mu^e$ .

$$P(z(t_0) \in V) = \int_V \mu_0 \quad . \quad (2.76)$$

Caso se queira fazer inferências sobre valores de observáveis noutros instantes, é necessário encontrar uma densidade de probabilidade para o novo instante  $t$ . Ou seja, é preciso caracterizar a variável aleatória "estado do sistema em  $t$ ,  $z(t)$ ". Num sistema clássico, que se espera determinístico, a densidade de probabilidade condicionada "z(t) dado z(t<sub>0</sub>)",  $f_{t|t_0}$ , é conhecida:  $f_{t|t_0}[z_0](z_1) = \delta(z_1 - \phi_{\Delta t}(z_0))$ , com  $\Delta t = t - t_0$ . Ou seja, dado o estado no instante  $t_0$ , conhece-se com precisão absoluta o estado em qualquer outro instante. Conhecendo  $f_{t_0}$  e  $f_{t|t_0}$ , obtém-se  $f_t$  usando a definição de probabilidade condicionada,

$$f_t(z) = \int_{\Omega} f_{t|t_0}[z](z_0) f_{t_0}(z_0) dz_0 \quad . \quad (2.77)$$

Fazendo a transformação de coordenadas  $z_1 = \phi_{\Delta t}(z_0)$ ,

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} f_{t|t_0}[z](\phi_{-\Delta t}(z_1)) f_{t_0}(\phi_{-\Delta t}(z_1)) |\partial_z \phi_{-\Delta t}| dz_1 = \\ & \int_{\Omega} \delta(z - z_1) f_{t_0}(\phi_{-\Delta t}(z_1)) |\partial_z \phi_{-\Delta t}| dz_1 = f_{t_0} \circ \phi_{-\Delta t} |\partial_z \phi_{-\Delta t}|(z) \quad . \end{aligned} \quad (2.78)$$

Portanto

$$\mu_t(V) = \int_V f_t \circ \phi_{-\Delta t} |\partial_z \phi_{-\Delta t}|(z) dz = \int_{\phi_{-\Delta t}(V)} f_{t_0}(z) dz = \mu_{t_0}(\phi_{-\Delta t}(V)) \quad , \quad (2.79)$$

que é a definição da dinâmica estatística  $\phi^E$ .

**Proposição 2.80** (equação de continuidade). *A trajectória do sistema estatístico respeita a condição*

$$(\partial_t f + \mathcal{L}_X(f))\mu^e + f \mathcal{L}_X(\mu^e) = 0 \quad , \quad (2.81)$$

a que se chama equação de continuidade para a probabilidade.

*Demonstração.* É possível reescrever o integral no volume evoluído como um integral sobre o volume inicial:

$$\int_V f_0 \mu^e = \int_{\phi_t(V)} f_t \mu^e = \int_V \phi_t^*(f_t \mu^e) \quad , \quad (2.82)$$

onde se usa o conceito de pull-back  $\phi_t^*$  [13]. Usando a arbitrariedade do volume  $V$ ,

$$\phi_t^*(f_t \mu^e) = f_0 \mu^e \quad . \quad (2.83)$$

Aplicando a derivada temporal para  $t = 0$ ,

$$\partial_t \phi_t^*(f_t \mu^e) = 0 \quad (2.84)$$

$$\partial_t f_t \mu^e + \mathcal{L}_X(f_t \mu^e) = 0 \quad (2.85)$$

$$(\partial_t f_t + \mathcal{L}_X(f_t))\mu^e + f_t \mathcal{L}_X(\mu^e) = 0 \quad , \quad (2.86)$$

onde  $X$  é o campo vectorial associado a  $\phi$  e  $\mathcal{L}_X$  é a derivada de Lie [9] na direcção  $X$ .  $\square$

**Exemplo 2.87.** No caso de  $\Omega = \mathbb{R}^n$ , obtém-se a equação de continuidade convencional.  $X$  é o vector

velocidade no espaço de fases  $\xi$  e  $\mathcal{L}_X$  é a derivada material.  $\mu^e = \mu^c = dz$ .

$$X = \xi \quad (2.88)$$

$$\mathcal{L}_X(f) = \xi \cdot \partial_z f \quad (2.89)$$

$$\mathcal{L}_X(dz) = \partial_z \cdot \xi dz \quad (2.90)$$

### 2.2.2 Princípio da Equiprobabilidade e Sistemas Ergódicos

Existem resultados matemáticos que procuram justificar a eficácia do princípio da equiprobabilidade. Em particular, considere-se sistemas experimentais que estejam em equilíbrio. Uma forma de obter valores independentes do tempo, é fazer a média para todo o domínio temporal. Parte-se de um sistema físico qualquer  $(\Omega, \phi)$  e do sistema físico estatístico associado. Considera-se um terceiro sistema, em tudo igual ao sistema estatístico, excepto no espaço de estados: passa a ser dado por  $\bar{\mu}$ ,

$$\mu \rightarrow \bar{\mu} \quad (2.91)$$

$$\bar{\mu} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T}^T \mu_t dt \quad (2.92)$$

Admite-se que é no valor esperado contra esta medidas que está o conteúdo físico. Considere-se a relação de equivalência

$$\mu \sim \mu' \iff \bar{\mu} = \bar{\mu}' \quad (2.93)$$

Pode-se usar esta equivalência para classificar o espaço  $M(\Omega)$ . Define-se uma classe que inclui todos os  $\mu$  em que  $\bar{\mu}$  não converge.

Os resultados físicos são os mesmos, para qualquer escolha de ensemble dentro da mesma classe. Ou seja, encontrou-se uma simetria na escolha do ensemble. Quando só existe uma classe, a escolha do ensemble fica trivial: qualquer elemento de  $M(\Omega)$  gera os mesmos resultados físicos.

Escolhido  $\mu' \neq \mu$ , espera-se que em geral  $\bar{\mu}' \neq \bar{\mu}$ . O teorema ergódico de Birkhoff[18] permite identificar subconjuntos  $\{\mu\}_{\bar{\mu}} \subset M(\Omega)$  em que todos os elementos resultam no mesmo  $\bar{\mu}$ . Esboça-se o enunciado do Teorema ergódico de Birkhoff. Imagine-se que se tem  $\mu^b$  ( $b$  de Birkhoff) invariante para o fluxo. Ou seja,

$$\mu^b = \mu_t^b \quad \forall t \quad (2.94)$$

Para além disso, sabe-se que únicos volumes invariantes têm medida  $\mu^b$  0 ou 1:

$$V = \phi_t(V) \implies \mu^b(V) = 0 \vee \mu^b(V) = 1 \quad (2.95)$$

Então, o teorema de Birkhoff diz que para qualquer  $\mu = f \mu^b$  com  $f$  suficientemente regular,  $\bar{\mu} = \overline{\mu^b} = \mu^b$ . Neste caso, diz-se que o sistema é ergódico para a medida  $\mu^b$  (ou para qualquer outra medida da forma  $f \mu^b$ ). Um sistema diz-se ergódico se existir uma medida para a qual é ergódico.

Um exemplo conhecido é o oscilador harmónico. Para simplificar, considere-se o caso em que a constante de mola é 1. A invariância da medida é satisfeita por qualquer  $\mu \propto \mu(E) = dS_E$ , em que  $dS$  é uma densidade com suporte sobre curva de nível  $S_E : \mathcal{H} = E$  sobre a qual  $\mu$  tem valor constante. A segunda condição também é satisfeita por todas estas medidas: o movimento é uma rotação rígida, e verifica-se que os únicos volumes invariantes são as superfícies  $S$  inteiras.

Pode-se considerar  $\mu^{z_0} = \delta_{z_0} \mu^b$  onde  $z_0$  é um ponto qualquer de um volume  $V$  com  $\mu^b(V) = 1$ . Neste caso,  $\overline{\mu^{z_0}}$  converge para uma "crista" de Dirac sobre a trajectória que atravessa o ponto  $z_0$ , proporcional ao tempo passado em cada ponto. A invariância de  $V$  garante que a trajectória não abandona  $V$ . O teorema de Birkhoff resulta em

$$\overline{\mu^{z_0}} = \mu^b = \overline{\mu^{z_1}} \quad (2.96)$$

para quaisquer dois pontos  $z_1, z_0 \in V$ . Ou seja, para quase (em que o quase é relativo à medida  $\mu^b$ ) todas as condições iniciais, a trajectória passa tanto tempo em cada zona  $W \subset V$  quanto o valor de  $\mu^b(W)$ .

Uma das promessas do teorema é fornecer uma justificação para a hipótese de equiprobabilidade à priori. Considere-se um sistema Hamiltoniano isolado, do qual se conhece a energia  $E$  a menos de um pequeno desvio  $\delta E$ . Se se usar a hipótese de equiprobabilidade à priori e se se fizer  $\delta E \rightarrow 0$ , obtém-se o ensemble microcanónico,

$$\frac{dS_E}{|X_{\mathcal{H}}|} \quad (2.97)$$



Por definição, é uma densidade invariante para o fluxo. Caso se consiga provar a segunda condição do teorema, o teorema de Birkhoff justifica a hipótese de equiprobabilidade à priori.

**Nota 2.98.** O termo  $1/|X_{\mathcal{H}}|$  é a dimensão transversal da região limitada pelas curvas de nível  $\mathcal{H} = E, \mathcal{H} = E + \delta E$ : como se sabe que o sistema Hamiltoniano conserva o volume e que portanto o ensemble evolui como um fluido incompressível com fluxo tangente às folhas  $\mathcal{H} = E, \mathcal{H} = E + \delta E$ , é imediato que a largura do tubo (região entre as 2 folhas de energia) deve ser inversamente proporcional ao módulo da velocidade  $|X_{\mathcal{H}}|$ . Como o tubo é preenchido uniformemente, Quando a largura fica infinitesimal as zonas da folha obtida são tanto mais amostradas quanto maior a largura do tubo .

No caso de um sistema Hamiltoniano com  $\Omega = \mathbb{R}^n$ ,

$$X_{\mathcal{H}} \cdot X_{\mathcal{H}} = d\mathcal{H} \cdot \Lambda^{\top} \cdot \Lambda \cdot d\mathcal{H} = d\mathcal{H} \cdot d\mathcal{H} \quad . \quad (2.99)$$

### 2.2.3 Sistemas Hamiltonianos

**Definição 2.100** (Sistema estatístico Hamiltoniano). Seja  $(\Omega, w, \mathcal{H}, N)$  um sistema físico Hamiltoniano. Considere-se o sistema estatístico associado, com  $\mu^e = \mu^w$ .  $\mu^w$  é a densidade obtida da forma de volume de Liouville[9],  $\mu^w = \frac{1}{n!} w \wedge \dots \wedge w$ . A função  $f_t$  em  $\mu_t = f_t \mu^w$  é suave tanto sobre a variedade como no tempo. Chama-se a este sistema **Sistema estatístico Hamiltoniano**.

**Nota 2.101.** No caso típico com  $\Omega = \mathbb{R}^n$ , a medida  $\mu^w$  coincide com a medida canônica de  $\mathbb{R}^n$ , dz.

**Proposição 2.102.** A trajectória deste sistema respeita a equação de Liouville:

$$\partial_t f_t + \{f_t, \mathcal{H}\} = 0 \quad . \quad (2.103)$$

*Demonstração.* Parte-se da equação de continuidade 2.80,

$$\left( \partial_t f + \mathcal{L}_{X_{\mathcal{H}}}(f) \right) \mu^w + f \mathcal{L}_{X_{\mathcal{H}}}(\mu^w) = 0 \quad , \quad (2.104)$$

onde se fez  $\mu^e = \mu^w$ .

O sistema ser Hamiltoniano implica que a densidade  $\mu^w$  é invariante para  $\phi$ [9], ou seja,  $\phi_i^*(\mu^w) = \mu^w$ . O termo  $\mathcal{L}_{X_{\mathcal{H}}}(\mu^w)$  é a derivada temporal de  $\phi_i^*(\mu^w)$ . Logo, é 0.  $\mu^w$  é diferente de 0 em todo o domínio. Logo,

$$\partial_t f + \mathcal{L}_{X_{\mathcal{H}}}(f) = 0 \quad . \quad (2.105)$$

A derivada de Lie de uma função é a actuação do vector sobre essa função,

$$\begin{aligned} \partial_t f + X_{\mathcal{H}}(f) &= 0 \\ \partial_t f + \{f, \mathcal{H}\} &= 0 \quad , \end{aligned} \quad (2.106)$$

onde se usou a definição do parêntesis de Poisson simplético. □

A equação obtida permite calcular a evolução do ensemble, partindo da evolução do sistema não estatístico associado. No entanto, pode-se ver a física estatística de forma independente.

**Proposição 2.107.** Um sistema estatístico Hamiltoniano com  $\Omega = \mathbb{R}^n$  é uma variedade de Poisson de dimensão infinita, com parêntesis dados por

$$\{\{A, B\}\}(\mu) = \int_{\Omega} \mu \{d_{\mu} A, d_{\mu} B\} \quad (2.108)$$

e com Hamiltoniano  $H : M(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$

$$H(\mu) = \mu(\mathcal{H}) = \int_{\Omega} \mathcal{H} \mu \quad (2.109)$$

**Nota 2.110.**  $\langle \bullet, \bullet \rangle$  é um produto interno.



*Demonstração.* A prova de que  $\{\{\bullet, \bullet\}\}$  é um parêntesis de Poisson está em [11] (Trata-se de um exemplo de um parêntesis de Lie-Poisson). Para verificar que gera a dinâmica correcta, basta verificar que se obtém a equação de Liouville da equação

$$\partial_t f = \{\{f, H\}\} \quad . \quad (2.111)$$

$$\begin{aligned} d_\mu f &= \mathbb{1} \\ d_\mu H &= d_\mu \langle f, \mathcal{H} \rangle = \langle \mathbb{1}, \mathcal{H} \rangle = \mathcal{H} \end{aligned} \quad (2.112)$$

Para este espaço de fases,  $\mu^w$  é a medida canónica  $\mu^c = dz$ .

O sistema Hamiltoniano está equipado com o parêntesis de Poisson canónico em  $\mathbb{R}^{2n}$ ,  $\{f, \mathcal{H}\} = df \cdot \Lambda \cdot d\mathcal{H}$ .

$$\begin{aligned} \{\{f, H\}\}(f) &= \int_{\Omega} f(d\mathbb{1} \cdot \Lambda \cdot d\mathcal{H}) = -df \cdot \Lambda \cdot d\mathcal{H} - \int_{\Omega} f d \cdot (\Lambda \cdot dH) \\ &= -\{f, \mathcal{H}\} - \int_{\Omega} f d \cdot (\Lambda \cdot dH) \end{aligned} \quad (2.113)$$

, onde se fez uma integração por partes.

O último termo é um traço de uma matriz anti simétrica:

$$d \cdot (\Lambda \cdot dH) = \text{Tr}(\Lambda \cdot d^2 H) = -\text{Tr}(d^2 H \cdot \Lambda) = -\text{Tr}(\Lambda \cdot d^2 H) = 0 \quad . \quad (2.114)$$

□

**Nota 2.115.** *Espera-se que a generalização desta proposição para um sistema Hamiltoniano com espaço de fases uma variedade suave em geral seja simples. No entanto, para o fazer seriam necessários introduzir conceitos que não teriam outra utilidade neste trabalho.*

Deste ponto de vista, a equação fundamental é a equação de Liouville, na forma 2.108 . Usando-a como ponto de partida, elimina-se a necessidade de pensar no estado da física estatística, o ensemble, como uma probabilidade. O princípio de equiprobabilidade à priori passa a ser uma receita heurística para encontrar o ensemble adequado ao estudo de um dado sistema. Lembra-se que a sua justificação é pragmática, ou seja, o princípio é válido porque os resultados experimentais tendem a ser congruentes com a sua utilização[17]. A interpretação estatística não é necessária à física estatística. Passa-se a falar da física de ensembles, em que o ensemble deve ser entendido como uma densidade cuja justificação não tem de ser probabilística. Passa a ser uma densidade que, se bem escolhida, é capaz de gerar a evolução correcta dos observáveis de um sistema. Caso se use uma densidade com suporte sobre um único ponto, recuperam-se as equações de Newton. Usando a densidade que resulta das estimativas para os erros experimentais, obtêm-se as equações de Newton, a menos dos erros da medição.



# Teoria das Deformações

## 3.1 Introdução

O estudo da física pela ordem histórica obriga a uma ruptura particularmente violenta na transição da **MC** para a **MQS**[11]. A formulação da mecânica Quântica no espaço de fases (a que se chama **MQW** [4, 10]) é uma alternativa equivalente a **MQS**, numa grande classe de sistemas físicos, com a vantagem de minimizar a radicalidade da transição [11].

	Estado	Observáveis	Observação	Dinâmica
<b>MCE</b>	Densidades $\mu$ no espaço de fases $\Omega$	Funções $n$ em $\Omega$	$\int_{\Omega} n\mu$	$\{\bullet, \mathcal{H}\}$
<b>MQW</b>	Densidades $\mu$ em $\Omega$	Funções $n$ em $\Omega$	$\int_{\Omega} n\mu$	$\{\bullet, \mathcal{H}\}^*$
<b>MQS</b>	Matrizes densidade $\rho$ no espaço $V$	Operadores lineares $N$ em $V$	$\text{Tr } \rho N$	$\frac{1}{i\hbar} [\bullet, H]$

Tabela 3.1: componentes das 3 teorias físicas.  $\mathcal{L}(V)$  é o espaço linear de operadores de  $V$ .

Como o nome sugere, o conceito de espaço de fases sobrevive intacto. Os observáveis passam a ser funções no espaço de fases clássico. Duas teorias dizem-se equivalentes se existir uma tradução bijectiva entre todos os seus componentes. É suficiente estabelecer a tradução dos observáveis. Considere-se um sistema quântico com  $\mathcal{H} = f(\hat{X}, \hat{P})$ . Dado um observável, a correspondência entre a sua representação em **MQS** e **MQW** é dada pela transformação de Wigner. À correspondência inversa chama-se transformação de Weyl[10]. Em particular, a matriz densidade transforma-se numa função densidade  $f$ , semelhante a um ensemble da física estatística clássica. Os valores esperados são "médias" ponderadas por esta pseudo-probabilidade. Alternativamente à utilização da transformada de Wigner, pode-se simplesmente substituir o produto de operadores por um operador bi-diferencial a que se chama produto de Moyal. O comutador transforma-se no parêntesis de Moyal. O produto de Moyal, e consequentemente o Parêntesis de Moyal, expandem-se numa série em  $\hbar$ . Se só se conservar o termo de ordem 0, obtém-se a equação de Liouville e os observáveis clássicos, ou seja, a teoria clássica é o termo de ordem 0 da teoria quântica.

A teoria das deformações ajuda a fazer o caminho inverso, a quantização de um sistema clássico[19]. Intuitivamente, a uma deformação de um objecto é um movimento restringido sobre o espaço de todas as versões possíveis do objecto de partida. Um objecto diz-se estável para um tipo de deformação, se for equivalente (para uma relação de equivalência escolhida) a todas as deformações consideradas. O produto de Moyal é uma deformação do produto clássico, no espaço de produtos associativos com propriedades específicas, a que se chamam produtos estrela [19]. É sabido que o produto clássico não é

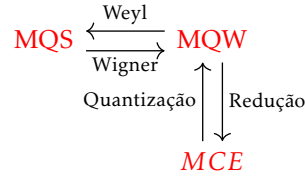


Figura 3.1: relações entre as teorias físicas

estável para uma relação de equivalência natural [20]. A relação inesperada entre o produto de funções e o parêntesis de Poisson permite utilizar a deformação do produto como motivação para a deformação do parêntesis.

No final, a teoria das deformações fornece uma justificação, independente da **MQS**, para a álgebra não comutativa dos observáveis e para uma dinâmica equivalente à dada pelo comutador quântico, ingredientes imprescindíveis numa teoria quântica.

### 3.2 Mecânica Quântica no espaço de Fases

Um sistema quântico típico na linguagem de Hilbert é descrito pelos elementos:

- $\Omega = \{|\psi\rangle \in V : \langle\psi|\psi\rangle = 1\}$ , onde  $V$  é um espaço de Hilbert;
- $N(\Omega) = \{A \in \mathcal{L}(V) : A^\dagger = A\}$ ,  $\mathcal{L}(V)$  espaço de operadores lineares de  $V$ ;
- $\partial_t A = [A, H] = A.H - H.A$ , onde  $H$  é um observável específico do sistema, a que se chama Hamiltoniano;
- $\langle A \rangle_{|\psi\rangle} = \langle\psi|A|\psi\rangle$ .

Trata-se o caso particular de um sistema quântico da forma

- $V = \text{span}\{|x\rangle : X|x\rangle = x|x\rangle\}$ ;
- $H = f(X, P)$
- $[X, P] = i\hbar$

A prescrição de Weyl é uma tentativa de encontrar uma representação completa de **MQS** em que os observáveis são funções do espaço de fases clássico. O objectivo é preencher a tabela 3.2. Usando a representação alternativa do estado por uma matriz de densidade  $\rho$ , que se trata de um observável de **MQS**, obtém-se que o estado será representado por uma função  $f \in N(\Omega)$ .

	<b>MQS</b>	<b>MQW</b>
Estado	$ \phi\rangle$	$N(\Omega)$
Observáveis	$\mathcal{L}(V)$	$N(\Omega)$
Observação	$\text{Tr } \rho A$	?
Dinâmica	$[\bullet, H]$	?

Tabela 3.2: Objectivo da prescrição de Weyl.

**MQS** baseia-se fortemente na álgebra dos seus operadores. Assim, uma boa estratégia para obter uma teoria equivalente é usar um homomorfismo de álgebras, ou seja, uma tradução que comuta tanto com o produto como com a soma, para além de ser linear.

$$w(A.B) = w(A) \star w(B) \quad (3.1)$$

$$w(A + B) = w(A) \oplus w(B) \quad (3.2)$$

Espera-se também que exista a possibilidade de saltar entre representações. Ou seja, a correspondência entre observáveis e estados deve ser biunívoca. Se tudo isto for possível, torna-se irrelevante qual das duas teorias se usa: a qualquer momento é possível traduzir os resultados obtidos de uma para outra, com a garantia de que coincidem. A soma é escolhida trivialmente:  $\oplus$  é a soma ponto a ponto de funções.

Usar o produto ponto a ponto não funciona: a álgebra de partida é não comutativa, e este produto é comutativo. Desta forma, seria impossível inverter a operação, já que  $X.P$  e  $P.X$  seriam representados pelo mesma função  $xp$ . A prescrição de Weyl é o ingrediente chave na tentativa de tradução. Vai permitir construir ao mesmo tempo  $\star$  e  $w$ .

Apesar de se querer partir de um operador e obter uma função, é mais simples se se pensar na operação inversa. Nomeadamente, a qualquer monómio  $h$ ,  $h(x, p) = x^i p^j$ , associa-se o operador  $W(h)(X, P)$ , que é o valor médio dos produtórios de todas as permutações de uma lista com  $i$  elementos  $X$  e  $j$  elementos  $P$ . (Para simplificar a notação, por vezes refere-se um polinómio pela sua forma avaliada). Chama-se a esta simetrização de um polinómio  $S(h)$ . Por exemplo,

$$W(x^2p)(X, P) = \frac{1}{3}(X.X.P + X.P.X + P.X.X) = S(X^2P) \tag{3.3}$$

$W(x^2p)(X, P)$  deve-se ler da seguinte forma: o operador associado ao polinómio clássico  $x^2p$  é um novo polinómio  $W(x^2p)$  aplicado aos operadores  $X, P$ . Desta forma, estabelece-se uma relação biunívoca entre polinómios de operadores completamente simétricos e monómios no espaço de fases,

$$\begin{aligned} w(S(u))(x, p) &= u(x, p) \\ W(u)(X, P) &= S(u)(X, P) \end{aligned} \tag{3.4}$$

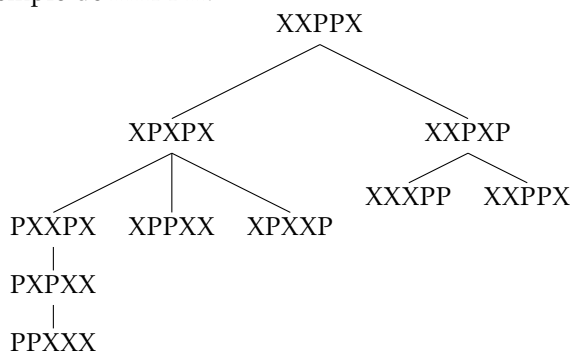
À transformação  $w$  chama-se transformação de Wigner e a  $W$  chama-se transformação de Weyl.

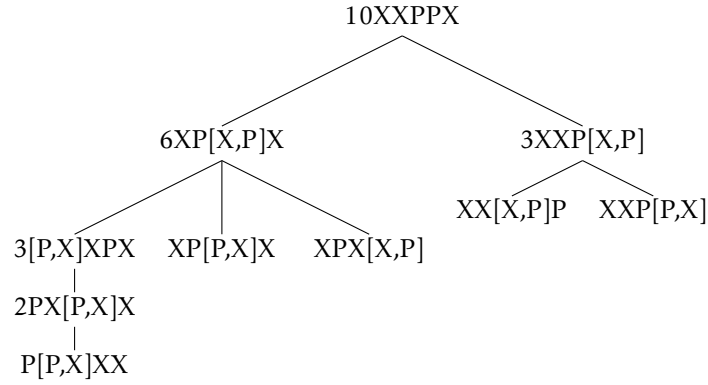
Usando a correspondência obtida, tenta-se transformar qualquer monómio  $u$  de operadores. Faz-se o seguinte:

- arrumam-se todas as permutações numa árvore, em que o primeiro nível é o monómio  $u(X, P)$  que se quer transformar. O nível 1 são todas as permutações que são obtidas de  $u$  (que é o nível 0) fazendo a troca de 2 elementos contíguos. O nível 2 é aplicar a mesma regra a cada um dos elemento do nível 1, eliminando repetições. No final, a árvore contém todas as permutações possíveis de  $u(X, P)$ , em que cada uma aparece uma única vez.
- começando das folhas da árvore, usa-se a relação de comutação para escrever cada uma das folhas à custa do nó pai. É possível, graças à forma como se preencheu a árvore. Substitui-se cada folha pelo termo extra (relacionado com o comutador), e multiplica-se o nó pai pelo número de filhos mais 1. Itera-se sobre todos os níveis da árvore a até ao nível 0.

Somando todos os elementos da árvore inicial, obtém-se  $S(u)$ , para o qual se conhece a transformação de Wigner. As operações aplicadas para obter a árvore final mantêm constante a soma de todos os nós, pelo que  $W(S(u)) = W(T(u))$ , em que  $T(u)$  é a soma dos nós da árvore final. Todos os nós finais têm grau estritamente inferior a  $u$ , tanto em  $X$  como em  $P$ , pelo que o problema de encontrar  $w(u)$  converteu-se no problema de encontrar a representação de monómios de grau estritamente inferior a  $u$ . Como os monómios de grau 1 são completamente simétricos, repetindo o processo e usando a linearidade de  $w$  obtém-se a representação de qualquer monómio de operadores.

**Exemplo 3.5.** Usa-se o exemplo de  $XXPPX$ .





Somando todos os nós,

$$10S(XXPPX) = 10XXPPX + 6XP[X,P]X + 3[P,X]XPX + 2PX[P,X]X + P[P,X]XX + XP[P,X]X + XPX[X,P] + 3XXP[X,P] + XX[X,P]P + XXP[P,X] \quad (3.6)$$

$$10XXPPX = 10S(XXPPX) - i\hbar(3XPX + 3XXP) \quad (3.7)$$

Falta transformar os monómios  $XPX$  e  $XXP$ . Aplicando-lhes o mesmo tratamento,



$$3S(XPX) = 3XPX + [P,X]X + X[X,P] = 3XPX \quad (3.8)$$

$$3XPX = 3S(XPX) \quad (3.9)$$

$$3S(XXP) = 3XXP + 2X[P,X] + [P,X]X = 3XXP - 3i\hbar X \quad (3.10)$$

$$3XXP = 3S(XXP) - i\hbar X \quad (3.11)$$

$$XXPPX = S(XXPPX) - i\frac{3}{10}\hbar(S(XPX) + S(XXP) - i\hbar S(X)) \quad (3.12)$$

$$w(XXPPX) = x^3 p^2 - i\frac{3}{10}\hbar(2x^2 p - i\hbar x) \quad (3.13)$$

Limita-se os observáveis em  $\mathcal{L}(V)$  a séries formais de  $X, P$ , ou seja, a somas infinitas sobre todos os monómios possíveis de  $X, P$ . Quer-se obter a regra do produto que resulta da prescrição de Weyl, para poder definir  $\star$ .

A prescrição de Weyl resulta na seguinte propriedade:

$$\begin{aligned}
 (sX + tP)^n &= W((sx + tp)^n)(X, P) \\
 &\implies \\
 \exp(sX + tP) &= W(\exp(sx + tp))(X, P) \quad (3.14)
 \end{aligned}$$

A fórmula de Baker–Campbell–Hausdorff, resultado de teoria de grupos, diz que

$$\exp(sX + tP) \cdot \exp(s'X + t'P) = \exp(sX + tP + s'X + t'P) \exp([sX + tP, s'X + t'P]) \quad (3.15)$$

O comutador do lado direito é

$$\begin{aligned}
 [sX + tP, s'X + t'P] &= i\frac{\hbar}{2}(s, t) \cdot \Lambda(s', t') \\
 \Lambda &= \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.16)
 \end{aligned}$$

Se se aplicar a correspondência  $w$  à equação 3.15,

$$\exp(sx + tp) \star \exp(s'x + t'p) = \exp(sx + tp + s'x + t'p) \exp(i\frac{\hbar}{2}(s, t) \cdot \Lambda(s', t')) \quad (3.17)$$

Comparam-se os 2 lados em relação ao grau total  $n$  em  $s, t$  e ao grau total  $m$  em  $s', t'$ . O grau total em  $s, t$  de um termo da forma  $s^i t^j \dots$  é  $i + j$ . Fica então,

$$(sx + tp)^n \star (s'x + t'p)^m = \sum_j j! \binom{n}{j} \binom{m}{j} (sx + tp)^{n-j} (s'x + t'p)^{m-j} \left( i \frac{\hbar}{2} (s, t) \cdot \Lambda \cdot (s', t') \right)^j . \quad (3.18)$$

Tem-se que

$$\begin{aligned} \nabla^j (sx + tp)^n &= j! \binom{n}{j} (sx + tp)^{n-j} (s, t)^{\otimes j} \\ (s, t)^{\otimes j} &= (s, t) \otimes \dots \otimes (s, t) , \end{aligned} \quad (3.19)$$

onde  $\nabla^j$  é o tensor das derivadas de ordem  $j$ ,  $\otimes$  é o produto tensorial e  $\Lambda(v_1, v_2) = v_1 \cdot \Lambda \cdot v_2$ .

Tem-se também que

$$\left( i \frac{\hbar}{2} (s, t) \cdot \Lambda \cdot (s', t') \right)^j = \left( i \frac{\hbar}{2} \right)^j \Lambda^{\otimes j} ((s, t)^{\otimes j}, (s', t')^{\otimes j}) , \quad (3.20)$$

onde

$$\Lambda^{\otimes j} ((s, t)^{\otimes j}, (s', t')^{\otimes j}) = \Lambda^{i_1 k_1} \dots \Lambda^{i_j k_j} (s, t)_{i_1} (s', t')_{k_1} \dots (s, t)_{i_j} (s', t')_{k_j} . \quad (3.21)$$

Substituindo em 3.18,

$$(sx + tp)^n \star (s'x + t'p)^m = \sum_j \frac{1}{j!} \left( i \frac{\hbar}{2} \right)^j \Lambda^{\otimes j} (\nabla^j ((sx + tp)^n), \nabla^j ((sx + tp)^m)) . \quad (3.22)$$

Esta fórmula permite, graças à linearidade de  $\star$ , obter a representação do produto das representações de quaisquer monómios de operadores. Sejam  $F, G$  duas séries formais, com  $w(F) = f$  e  $w(G) = g$ . Então

$$w(F.G) = f \star g . \quad (3.23)$$

Obteve-se a representação do produto de operadores na linguagem do espaço de fases. Chama-se a  $\star$  **produto de Moyal**. Obtido o produto, preenche-se a entrada correspondente à dinâmica em **MQW** com o seu comutador (dividido por  $i\hbar$ , tal como em **MQS**). Chama-se à operação **parêntesis de Moyal**.

Para acabar de preencher a tabela, volta-se a usar a propriedade da prescrição de Weyl 3.15. A qualquer observável no espaço de fases, com transformada de Fourier  $\hat{g}$  em  $x$  e  $p$ ,

$$g(x, p) = \frac{1}{2\pi} \int \hat{g}(a, b) \exp(ia \cdot x + ib \cdot p) da db , \quad (3.24)$$

aplica-se  $W$  e usa-se formalmente 3.15 para obter

**Definição 3.25** (Transformação de Weyl).

$$W(g(x, p))(X, P) = \frac{1}{2\pi} \int \hat{g}(a, b) \exp(ia \cdot X + ib \cdot P) da db . \quad (3.26)$$

Se se quiser inverter esta operação, obtendo de novo  $g(x, p)$ , usa-se a fórmula

**Definição 3.27** (Transformação de Wigner).

$$w(G(X, P))(x, p) = \int \exp(-ipy/\hbar) \langle x + y/2 | G(X, P) | x - y/2 \rangle dy . \quad (3.28)$$

Utilizando esta transformação, verifica-se que a operação  $\text{Tr}$  corresponde à operação integral sobre o espaço de fases [10]. Para além disso, as propriedades de  $\star$  fazem com que o integral de  $f \star g$  coincida com o integral de  $fg$  (prova em 3.42). Assim, preenche-se a entrada "Observação" em **MQW** com  $\int_{\Omega} fg$  (que é a fórmula esperada, caso se pense em  $f$  como uma densidade de probabilidade).

Pode-se aplicar a transformação de Wigner à matriz densidade, obtendo a função que representa o estado em **MQW**. Esta função diz-se **de Wigner**.

Conclui-se que **MQW** tem exactamente os mesmos elementos que a física estatística de um sistema Hamiltoniano. A função de Wigner é semelhante a um ensemble, com algumas diferenças importantes. Em particular, deixa de representar uma densidade de probabilidade, já que pode ter zonas (em geral tem, [10]) com valores negativos.

	MQS	MQW
Estado	$ \phi\rangle, \rho$	$N(\Omega)$
Observáveis	$\mathcal{L}(V)$	$N(\Omega)$
Observação	$\text{Tr } \rho A$	$\int_{\Omega} f a$
Dinâmica	$\frac{1}{i\hbar} [\bullet, H]$	$\{\bullet, \mathcal{H}\}^{\star}$

Tabela 3.3: Elementos de MQW, resultado da prescrição de Weyl.

### 3.2.1 Produto de Moyal

A fórmula obtida para o produto de Moyal[3] pode ser generalizada para  $\Omega = \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N$ . Usa-se a notação  $z \in \Omega, z = (x, p) = (x_1, \dots, x_N, p_1, \dots, p_N)$ .

$$f \star g = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{i\hbar}{2} \right)^n P^n(f, g) \quad , \quad (3.29)$$

em que

$$P^n(f, g) = \Lambda^{i_1 j_1} \dots \Lambda^{i_n j_n} \partial_{i_1 \dots i_n} f \partial_{j_1 \dots j_n} g \quad . \quad (3.30)$$

$\Lambda^{ij}$  são as coordenadas do bi-vector de Poisson:

$$\Lambda = \begin{bmatrix} 0 & \mathbb{1} \\ -\mathbb{1} & 0 \end{bmatrix} \quad , \quad (3.31)$$

onde a matriz identidade  $\mathbb{1}$  tem dimensão  $N \times N$ .

Para  $n = 1$ ,

$$P^1(f, g) \equiv \{f, g\} = \Lambda(df, dg) = \partial_z f \cdot \Lambda \cdot \partial_z g \quad . \quad (3.32)$$

Estende-se a definição dos operadores P para poderem aceitar como argumentos vectores:

$$\begin{aligned} P(f, V)_i &= P(f, V_i) \\ P(V, X) &= \sum_i P(V_i, X_i) \quad . \end{aligned} \quad (3.33)$$

Os parêntesis de Moyal são dados por

$$\begin{aligned} \{f, g\}_{Moyal} &= \{f, g\}_{\star} \equiv \frac{1}{i\hbar} (f \star g - g \star f) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \left( \frac{i\hbar}{2} \right)^{2n} P^{2n+1}(f, g) \quad , \end{aligned} \quad (3.34)$$

onde se usou que  $P^{2n}(f, g) = P^{2n}(g, f)$ .

Derivam-se alguns resultados que serão úteis na aplicação às equações cinéticas.

#### Proposição 3.35.

$$P^n(f, g) = \partial_z \cdot (X^n(f, g)) \quad (3.36)$$

$$X^n(f, g) = P^{n-1}(f, \Lambda \cdot \partial_z g) = P^{n-1}(f, X_g) \quad (3.37)$$

*Demonstração.*  $X_g$  é o campo vectorial Hamiltoniano de  $g$ , 2.29.

$$\begin{aligned} P^n(f, g) &= \Lambda^{i_1 j_1} \dots \Lambda^{i_n j_n} \partial_{i_1 \dots i_n} f \partial_{j_1 \dots j_n} g = \\ &= \partial_z \cdot \left( \Lambda^{i_2 j_2} \dots \Lambda^{i_n j_n} (\partial_{i_2 \dots i_n} f \partial_{j_2 \dots j_n} \Lambda \cdot \partial_z g) \right) - \underbrace{\partial_{i_2 \dots i_n} f \partial_{j_2 \dots j_n} \text{Tr}(\Lambda \cdot \partial_z^2 g)}_0 = \partial_z \cdot P^{n-1}(f, \Lambda \cdot \partial_z g) \quad , \end{aligned} \quad (3.38)$$

onde  $\partial_z^2 g$  é a matriz hessiana de  $g$ . □

Concluiu-se que todas as correcções quânticas são divergências de campos vectoriais. Sendo a divergência uma operação linear, podem-se somar todos estes campos num único campo vectorial quântico:



**Definição 3.39** (Campos Hamiltonianos quânticos  $X^\star, X^-, X^+$ ).

$$\begin{aligned} X^\star(f, g) &:= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{i\hbar}{2} \right)^n X^n(f, g) \quad , \\ i\hbar X^-(f, g) &:= X^\star(f, g) - X^\star(g, f) \quad , \quad X^+(f, g) := X^\star(f, g) + X^\star(g, f) \\ X^\star &= \frac{X^- + i\hbar X^+}{2} \quad . \end{aligned} \quad (3.40)$$

O produto de Moyal fica

$$f \star g = fg + \partial_z \cdot X^\star(f, g) \quad . \quad (3.41)$$

**Proposição 3.42.**

$$\int_{\Omega} f \star g = \int_{\Omega} fg \quad (3.43)$$

*Demonstração.* Aplica-se o teorema de Gauss a  $X^\star(f, g)$  usando condições fronteira adequadas para anular o fluxo sobre a fronteira de  $\partial\Omega$ .

$$\int_{\Omega} f \star g = \int_{\Omega} fg + \overbrace{\int_{\partial\Omega} X^\star(f, g) \cdot n}^0 \quad (3.44)$$

□

Pode-se usar a comutatividade das derivadas para compactar a forma geral dos operadores  $P^n$ .

**Proposição 3.45.**

$$P^n(f, g) = \sum_{|I|+|J|=n} (-1)^{|J|} \binom{n}{|J|} C(I)C(J) \partial_x^I \partial_p^J f \partial_x^J \partial_p^I g \quad (3.46)$$

onde

- $I = (i_1, i_2, i_3)$  e  $J$  são multi-índices;
- $|I|$  é a soma das entradas de  $I$ ;
- $C(I) = |I|!/\Pi I!$ , onde  $\Pi I!$  é o produto dos factoriais das entradas de  $I$ ;
- $\partial_x^I = \partial_{x_1}^{i_1} \partial_{x_2}^{i_2} \partial_{x_3}^{i_3}$ .

*Demonstração.*

$$P^n(f, g) = \Lambda^{m_1 k_1} \dots \Lambda^{m_n k_n} \partial_{m_1 \dots m_n} f \partial_{k_1 \dots k_n} g \quad (3.47)$$

Fixe-se a sequência  $M = (m_1, \dots, m_n)$ . Coordenada a coordenada, só um valor  $k_i$  sobrevive às contracções com  $\Lambda$ : por cada linha de  $\Lambda^{ij}$ , só existe uma entrada diferente de 0. Assim, existe uma correspondência unívoca entre a sequência  $M$  e um termo da soma. Chama-se  $a(M)F(M)$  ao termo correspondente a  $M$  em que  $F$  é a parte correspondente às derivadas e  $a$  é um número.

As derivadas são comutativas.  $F(M)$  é insensível à ordem de  $M$ , ou seja, depende de  $M$  através do conjunto não ordenado  $\tilde{M} = \{m_i\}$ . Do mesmo modo,  $a(M)$  só depende do número de índices em  $M$  que correspondam a coordenadas do momento, que é também função de  $\{m_i\}$ . Identifica-se cada um destes conjuntos não ordenados por  $[I, J]$ , com  $I = (i_1, i_2, i_3), J = (j_1, j_2, j_3)$ , em que  $i_l$  é a contagem do número de índices de  $M$  iguais a  $x_l$  e  $j_l$  é a contagem do número de índices de  $M$  iguais a  $p_l$ . A correspondência  $\tilde{M} \rightarrow [I, J]$  é bijectiva. Como os termos somados são constantes sobre cada classe  $[I, J]$  e como as classes cobrem todos os valores  $M$ , a soma pode ser reparametrizada,

$$\sum_M \dots = \sum_{I, J} C(I, J) \dots \quad , \quad (3.48)$$

onde  $C(I, J)$  é a cardinalidade de  $[I, J]$ . Este número é obtido de um problema de contagem: dadas 3 + 3 caixas, com capacidades  $j_1, j_2, j_3, i_1, i_2, i_3$ , quantas formas há de as preencher, com  $n$  elementos distinguíveis. O resultado é a distribuição multinomial,

$$C(I, J) = \frac{n!}{i_1! i_2! i_3! j_1! j_2! j_3!} = \frac{n!}{|J|! |I|!} C(I) C(J) \quad . \quad (3.49)$$

$a(M)$ , é um produto do tipo  $1 \times -1 \dots$ , em que aparecem tantos  $-1$  quantos índices correspondentes a coordenadas  $p$ . Assim,  $a(M) = a([I, J]) = (-1)^{|J|}$ . □

**Proposição 3.50.** *Se  $f(x, p) = f(p)$ , então*

$$P^n(f, g) = (-1)^n \sum_{|J|=n} C(J) \partial_p^J f \partial_x^J g \quad . \quad (3.51)$$

*Se  $f(x, p) = f(x)$ , então*

$$P^n(f, g) = \sum_{|J|=n} C(J) \partial_x^J f \partial_p^J g \quad . \quad (3.52)$$

*Demonstração.* Se  $f(x, p) = f(x)$ , então  $\partial_p^I f = 0, \forall I$ . Da soma sobre os 2 multi-índices, só sobrevivem termos com  $I = (0, 0, 0)$ . Logo, a soma passa a ser  $\sum_{|J|=n}$ . O caso  $f(x, p) = f(p)$  é análogo. □

**Proposição 3.53.** *Sejam duas funções  $f(x), g(p)$ . Então*

$$P^n(f, g) = -1^{n-1} \sum_{|J|=n-1} C(J) \partial_p^J \partial_x^J P^1(f, g) \quad (3.54)$$

*Demonstração.*

$$P^n(f, g) = \sum_{|J|=n} (-1)^{|J|} C(J) \partial_p^J f \partial_x^J g \quad (3.55)$$

$$\sum_{|J|=n} (-1)^{|J|} C(J) \partial_p^J \partial_x^J (fg) \quad . \quad (3.56)$$

Considere-se o operador diferencial

$$D^n = \left( \sum_{|J|=1} (\partial_x \partial_p)^J \right)^n \quad (3.57)$$

Usando a comutatividade das derivadas, pode ser escrito como combinação linear sobre o conjunto

$$\{(\partial_p \partial_x)^J, |J| = n\} \quad (3.58)$$

$$, \quad (3.59)$$

ou seja,

$$D^n = \sum_{|J|=n} a(J) (\partial_x \partial_p)^J \quad . \quad (3.60)$$

Os coeficiente  $a(J)$  resultam de uma contagem.  $a(J)$  é o número de formas de construir um multi-índice  $J^n$  com  $|J^n| = n$ , a partir de uma soma de  $n$  multi-índices  $J^1, |J^1| = 1$ . É dado pela distribuição Multinomial,  $a(J) = C(J)$ . Logo,

$$P^n(f, g) = D^n(fg) = D^{n-1} \circ D^1(fg) = D^{n-1} \circ P^1(f, g) \quad (3.61)$$

□

**Proposição 3.62.** *Sejam duas funções  $f(x), g(p)$ . Então*

$$f \star g = fg - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n)!} \left( \frac{-i\hbar}{2} \right)^n \sum_{|J|=n-1} C(J) \partial_p^J \partial_x^J \{f, g\} \quad (3.63)$$

*Demonstração.* Aplica-se 3.53 a cada um dos operadores  $P^n$ . □

### 3.3 Deformações

Caso se conserve apenas os termos de ordem 0 em  $\hbar$  em MQW, obtém-se MCE[6]. Num certo sentido, MCE é um caso particular de MQW, quando o estado  $f$  é escolhido de tal forma que as correcções quânticas na equação de Liouville são pequenas. MCE é obtida por redução[21] de MQW. Fica assim motivada a pergunta inversa : dado MCE, haverá forma de motivar a Mecânica Quântica (MQ)? Em geral, não é expectável que a redução de uma teoria possa ser usada para recuperar a teoria completa. A teoria das deformações serve para investigar esta questão. Surpreendentemente, verifica-se que em muitos casos não só é possível percorrer este caminho como há uma forma canónica (no sentido de ser uma correspondência entre teorias, e não uma correspondência entre sistemas) de o fazer. De certa forma, é como se a redução fosse invertível. Nesta secção discutem-se os resultados que permitem percorrer este caminho, ou seja, fazer a quantização de um sistema clássico usando a teoria das deformações. Enuncia-se um teorema geral, que responde positivamente à existência deste procedimento para qualquer variedade de Poisson com espaço de fases finito.

#### 3.3.1 Deformações formais de Álgebras

##### álgebras

**Definição 3.64** (Álgebras).  $(\mathcal{A}, *, +)$  diz-se uma álgebra sobre um corpo  $k$  se  $V$  for um espaço vectorial sobre  $k$  e se  $*$  for uma operação (k-)bilinear de  $\mathcal{A} \times \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$ . Ou seja, para quaisquer  $x, y, z \in \mathcal{A}$ ,  $a, b \in k$ ,

$$(x + y) * z = x * z + y * z \quad , \quad (3.65)$$

$$x * (y + z) = x * y + x * z \quad , \quad (3.66)$$

$$(a.x) * (b.y) = (ab).(x * y) \quad . \quad (3.67)$$

Quando se quer referir só o produto, usa-se  $(\mathcal{A}, *)$  para identificar a álgebra  $(\mathcal{A}, *, +)$ . Quando não se quer referir nenhuma das operações, usa-se  $\mathcal{A}$  para identificar a álgebra  $(\mathcal{A}, *, +)$ .

Se o produto tiver propriedades adicionais, podem-se definir casos particulares de álgebras. Definem-se 3 casos particulares: álgebras associativas, de Lie e de Poisson:

**Definição 3.68** (Álgebra Associativa). Seja  $(\mathcal{A}, \cdot)$  uma álgebra. Se  $\forall x, y, z \in \mathcal{A}$

$$x \cdot (y \cdot z) = (x \cdot y) \cdot z \quad (\text{associatividade}) \quad , \quad (3.69)$$

diz-se que a álgebra é **associativa**.

**Definição 3.70** (Álgebra de Lie). Seja  $(\mathcal{L}, [\bullet, \bullet])$  uma álgebra. Se  $\forall x, y, z \in \mathcal{L}$

$$[x, y] = -[y, x] \quad (\text{anti-simetria}) \quad (3.71)$$

$$[x, [y, z]] + [y, [z, x]] + [z, [x, y]] = 0 \quad (\text{Identidade de Jacobi}) \quad (3.72)$$

Chama-se a  $[\bullet, \bullet]$  parêntesis de Lie e a álgebra  $(V, [\bullet, \bullet])$  diz-se de **Lie**.

**Definição 3.73** (Álgebra de Poisson). Seja  $(\mathcal{L}, [\bullet, \bullet])$  uma álgebra de Lie e  $(\mathcal{L}, \cdot)$  uma álgebra associativa. Se  $\forall x, y, z \in \mathcal{L}$

$$[x, [y, z]] = y \cdot [x, z] + [x, y] \cdot z \quad (\text{Identidade de Leibniz}) \quad (3.74)$$

passa-se a usar a notação  $[x, y] = \{x, y\}$ . chama-se a  $\{\bullet, \bullet\}$  parêntesis de Poisson e  $(\mathcal{L}, \{\bullet, \bullet\}, \cdot)$  diz-se uma **álgebra de Poisson**.

### Deformações formais

**Definição 3.75** (deformação formal de uma álgebra). Sejam  $(\mathcal{A}, *)$ ,  $(\mathcal{A}, *_t)$  duas álgebras tais que  $\forall x, y \in \mathcal{A}$

$$x *_t y = \sum_{n=0}^{\infty} t^n P^n(x, y) \quad , \quad (3.76)$$

com

$$P^0(x, y) = x * y \quad (3.77)$$

e  $P^n : \mathcal{A} \times \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$ , operador bi-linear de  $\mathcal{A}$ . A  $(\mathcal{A}, *_t)$  chama-se **deformação formal de  $(\mathcal{A}, *)$** .

Intuitivamente, a deformação é uma curva no espaço de todas as álgebras possíveis, que parte da álgebra que se está a deformar e em que o parâmetro formal  $t$  mede a distância percorrida. A direcção do movimento é dada pela escolha de  $\{P^n\}$ . A direcção pode ser restringida impondo a conservação de propriedades do produto. Pode-se falar assim de deformações associativas, deformações de Lie, etc.

**Definição 3.78** (álgebra estável).  $(V, *)$  diz-se estável para um conjunto de deformações  $D = \{(V, *_t)\}$  se existe um isomorfismo de álgebras entre todos os elementos de  $D$  e  $(V, *)$ .

Relembra-se a definição de isomorfismo de álgebras,

**Definição 3.79** (Isomorfismo de álgebras). Seja  $T : \mathcal{A}_1 \rightarrow \mathcal{A}_2$ , em que  $(\mathcal{A}_1, *_1, +_1)$  e  $(\mathcal{A}_2, *_2, +_2)$  são álgebras sobre  $k$ .  $T : \mathcal{A}_1 \rightarrow \mathcal{A}_2$  diz-se um isomorfismo de álgebras se é uma operação invertível tal que

$$T(ax) = aT(x) \quad (3.80)$$

$$T(x *_1 y) = T(x) *_2 T(y) \quad (3.81)$$

$$T(x +_1 y) = T(x) +_2 T(y) \quad , \forall x, y \in \mathcal{A}_1, a \in k \quad . \quad (3.82)$$

**Exemplo 3.83.** Em [20] usa-se a noção de estabilidade para fazer a transição entra a relatividade de Galileu e a relatividade restrita. Encontra-se um conjunto de deformações  $D$  para o qual a álgebra de Lie do grupo de Galileu não é estável. O produto desta álgebra é o comutador de matrizes,  $[A, B] = A.B - B.A$ . Todas as deformações em  $D$  são isomorfas ao grupo de Lorentz. O parâmetro  $t$  é identificado com  $\frac{1}{c^2}$ . O grupo de Lorentz é estável para qualquer deformação de Lie.

## 3.4 Deformação de variedades de Poisson

Um sistema Hamiltoniano clássico  $(\Omega, \mathcal{H})$  define uma álgebra de Poisson  $(N(\Omega), \{\bullet, \bullet\}, \cdot)$ . Em particular, a sua álgebra associativa pode ser deformada. Considere-se o conjunto de deformações da seguinte forma

**Definição 3.84** (produto estrela). Seja  $(V, *_t)$  uma deformação formal de  $(V, *)$ , com as seguintes propriedades:

- $*_t$  é formalmente associativo, ou seja

$$\sum_{i+j=n} P^i(P^j(a,b),c) = \sum_{i+j=n} P^i(a,P^j(b,c)) \quad (3.85)$$

- $P^n$  é um operador bidiferencial de ordem  $n$
- $1 *_t f = f$

Chama-se a  $*_t$  um **produto estrela**, e passa-se a usar a notação  $\star = *_t$

Verifica-se que álgebra clássica não é estável para este tipo de deformações[20]. Pode-se estranhar a escolha deste tipo de deformação em particular. Ou seja, parece ser improvável que alguém, partindo de **MC**, se lembrasse de deformar a teoria desta forma, a não ser que já conhecesse **MQ**. Existem duas propriedades de  $*$  que motivam fisicamente esta escolha. A primeira é que o produto continua a ser um operador local no espaço de fases, ou seja, o produto deformado só depende localmente dos valores dos observáveis. A localidade vem da natureza dos operadores. Como são operadores diferenciais, só investigam o comportamento da função localmente. As derivadas de ordem  $n$  têm um contributo da ordem de  $\hbar^n$ . Assim, Quanto mais macroscópico for um observável  $a$ , no sentido de ter derivadas de ordem superior pequenas, menor são as contribuições quânticas. Uma função com muita micro-estrutura resulta em contribuições quânticas grandes. Outra razão é que o comutador do produto associativo é uma deformação do parêntesis de Poisson. Como se trata de um comutador, tem uma propriedade simpática: partindo de um sistema clássico Hamiltoniano estatístico, com estado  $\mu = f\mu^e$ , as suas trajectórias são dadas pela dinâmica

$$\phi_t(f) = f \circ \exp(tX_{\mathcal{H}}) \quad . \quad (3.86)$$

Em geral, deformando o parêntesis de Poisson, não se tem uma fórmula semelhante para a dinâmica deformada. No entanto, no caso em que a deformação é dada por um comutador de um produto associativo,

$$\phi_t(f) = \exp\left(\frac{t}{i\hbar}\mathcal{H}\right)\star f \star \exp\left(-\frac{t}{i\hbar}\mathcal{H}\right) \quad (3.87)$$

$$\exp\star(g) = \sum_n \frac{1}{n!} g^{\star n} \quad . \quad (3.88)$$

Ou seja, continua a ser possível resolver formalmente o sistema deformado.

Apresentam-se agora os resultado que tornam natural relacionar a deformação do produto associativo com a deformação do parêntesis de Poisson.

**Proposição 3.89.** *A componente anti-simétrica de  $P^1$ ,  $P^1(f,g) - P^1(g,f)$ , define um parêntesis de Poisson.*

*Demonstração.* Começa-se por mostrar que o comutador do produto  $\star$  define uma parêntesis de Lie.

Antisimetria:

$$(f \star g - g \star f) = -(g \star f - f \star g) \quad (3.90)$$

Identidade de Jacobi:

$$[a, [b, c]_{\star}]_{\star} + [b, [c, a]_{\star}]_{\star} + [c, [a, b]_{\star}]_{\star} = 0 \quad (3.91)$$

Expandindo todos os comutadores,

$$a \star b \star c - b \star c \star a + c \star b \star a - a \star c \star b + \quad (3.92)$$

$$b \star c \star a - c \star a \star b + a \star c \star b - b \star a \star c + \quad (3.93)$$

$$c \star a \star b - a \star b \star c + b \star a \star c - c \star b \star a \quad (3.94)$$

, que é 0. Todas as 6 permutações de  $a, b, c$  estão incluídas, sendo que aparecem uma vez com sinal positivo e outra com sinal negativo.

Para além de ser um parêntesis de Lie, é um parêntesis de Poisson para o produto  $\star$ , ou seja, respeita a seguinte igualdade de Leibnitz:

$$[a, b \star c]_{\star} = b \star [a, c]_{\star} + [a, b]_{\star} \star c \quad (3.95)$$

$$a \star b \star c - b \star c \star a = b \star a \star c - b \star c \star a + a \star b \star c - b \star a \star c \quad (3.96)$$

Considere-se o produto  $\star_1$ ,

$$f \star_1 g = f \cdot g + t P^1(f, g) \quad (3.97)$$

$$f \star_1 g = f \star g + O(t^2) \quad (3.98)$$

A associatividade de  $\star$  implica a associatividade de  $\star_1$ : as equações 3.85 para  $n = 0, 1$  são as mesmas para os 2 produtos.

O comutador deste produto é, pelos mesmos argumentos acima, um parêntesis de Lie. A parte antisimétrica de  $P^1$  é dada pelo comutador deste produto, dividindo por  $t$ ,

$$P^1(f, g) - P^1(g, f) = \frac{1}{t} (f \star_1 g - g \star_1 f) = \frac{1}{t} [f, g]_{\star_1} \quad (3.99)$$

Só falta provar a identidade de Leibniz para esta operação. Obtêm-se directamente recolhendo os termos de ordem 0 em  $t$  na identidade de Leibniz de  $z[a, b \star c]_{\star}$ .  $\square$

O parêntesis de Poisson  $[\bullet, \bullet]_{\star_1}$  é igual para 2 produtos estrela equivalentes. Usa-se a relação de equivalência

**Definição 3.100** (equivalência  $\star$ ).

$$\star \sim \star' \quad (3.101)$$

$$\iff \quad (3.102)$$

$$\exists T : f \star g = T(T(f) \star' T(g)) \quad \forall f, g, \quad (3.103)$$

com  $T$  um automorfismo da forma

$$T(f) = f + \sum_{j=1}^{\infty} t^j B^j(f) \quad (3.104)$$

$B^j$  é um operador diferencial de ordem  $j$  [19]. Chama-se  $[\star]$  à classe de equivalência de  $\star$ .

**Nota 3.105.**  $T$  é um exemplo de tradução completa, já que o termo de ordem 0 é a identidade.

Cada classe  $[\star]$  define uma parêntesis de Poisson. Dado um parêntesis  $\{, \}$ , existirá sempre  $[\star]$  tal que  $\{, \} = [ , ]_{\star_1}$ ? A resposta positiva foi dada por Kontsevitch, como consequência de um teorema mais geral [19].

Pode-se ainda mostrar que qualquer classe  $[\star]$  tem como membro um produto em que o termo linear em  $t$  é  $[ , ]_{\star_1}$  [19].

Fica motivada a seguinte definição:

**Definição 3.106** (quantização por deformação). Uma quantização por deformação de uma variedade de Poisson  $(M, \cdot, \{, \})$  é uma deformação simultânea das álgebras associativa e de Lie. A deformação da álgebra associativa é um produto  $\star$ , para o qual  $P^1(f, g)$  é  $\{f, g\}$ . A deformação da álgebra de Lie é  $[f, g]_{\star}$ .

**Proposição 3.107.** Qualquer variedade de Poisson finita admite uma quantização por deformação. Existe uma regra canónica para encontrar  $\star$ .

A discussão da proposição encontra-se em [19]. A regra diz-se canónica porque tem uma forma geral, independente da variedade de Poisson particular. A prova do teorema que a justifica está em [5], tal como a sua construção explícita.

A principal razão para chamar a este tipo de deformação uma quantização é que  $\star$  coincide com o produto de Moyal, no caso simples de uma variedade simplética com espaço de fases  $\mathbb{R}^{2n}$ . Ou seja, o produto  $\star$  coincide com o produto quântico, quando se substitui  $t = i\hbar/2$ .

**Proposição 3.108.** *A deformação por quantização canónica de um sistema Hamiltoniano de dimensão finita é única, a menos da relação de equivalência. Em particular, transformações canónicas de coordenadas em  $\Omega$  resultam na transformação  $\star \rightarrow \star'$ , com  $\star' \sim \star$ .*

Esta proposição dá algum significado à relação de equivalência definida. Uma transformação canónica do espaço de fases do sistema Hamiltoniano, que conserva por definição a forma das equações de Hamilton, resulta num produto estrela equivalente ao produto estrela inicial. A prova está em [5, 19].

Naturalmente, não chega ter um produto  $\star$  para compreender a mecânica quântica. É preciso saber o que fazer com ele. No caso  $\mathbb{R}^{2n}$ , pode-se utilizar MQS como fonte de conteúdo físico. Ou seja, conceitos como o princípio de Incerteza, natureza da medição quântica, espectros, etc, são convertidos para a linguagem de MQW partindo de MQS. Quando não existe a bengala de uma teoria quântica típica já estabelecida, é preciso definir todos estes conceitos de forma independente. Encontra-se em [12] a aplicação deste ponto de vista ao cálculo dos espectros do oscilador harmónico e do átomo de hidrogénio. Para além da deformação do parêntesis, espera-se que os observáveis quânticos não sejam idênticos aos clássicos. Usando MQW, sabe-se que a função no espaço de fases que representa um observável quântico é dada pela transformação de Wigner do operador de MQS, que pode por exemplo ter termos dependentes de  $\hbar$ .

**Definição 3.109.** Seja uma teoria clássica. A quantização de um elemento  $A$  da teoria da teoria clássica é representado por  $A^\star$ . Usa-se ainda  $A^\Delta = A^\star - A$ .

Quando se parte de uma função clássica  $g$  não é expectável que a versão quântica  $g^\star$  seja idêntica. Por exemplo, para calcular o valor esperado da  $\mathcal{H}^2$ , com  $\mathcal{H} = p^2 + x^2$ , parece natural usar o observável  $\mathcal{H}^\star \star \mathcal{H}^\star$ . No entanto, se se partisse de  $(p^2 + x^2)(p^2 + x^2) = p^4 + 2x^2p^2 + x^4$  e se se tentasse fazer o mesmo, substituindo todos os produtos clássicos por produtos de Moyal usando  $x^\star = x, p^\star = p$ , o resultado seria diferente. O que se deve reter é que há produtos e produtos: é preciso escolher, seguindo algum critério, que substituições fazer. Assim, a quantização por deformação não resolve completamente o problema de quantização.

Nos casos mais simples, este tipo de problemas não aparece.

**Proposição 3.110.** *Seja um sistema quântico com  $[X, P] = i\hbar$ . A transformação de Wigner de um operador da forma  $f(X)$  é  $f(x)$ . A transformação de Wigner de um operador da forma  $f(P)$  é  $f(p)$ .*

*Demonstração.* Vê-se  $f(X)$  como uma série em  $X$ . Usando  $X \rightarrow x$ , obtém-se o resultado. Faz-se o análogo com  $f(P)$ .  $\square$





## Equações Cinéticas

As equações cinéticas surgem do estudo de gases, sistemas compostos por um número tendencialmente infinito de partículas em interacção. Generalizam-se para o caso de plasmas. Resultam do estudo do observável  $\mathcal{N}$ , que é a densidade do número de partículas sobre o espaço de fases de uma partícula virtual. Utilizando argumentos mais ou menos heurísticos, é possível reduzir o sistema estatístico sobre um plasma a este espaço mais pequeno, ou seja, se se admitir que só se está interessado na informação contida na densidade, podem-se usar aproximações que resultam numa evolução da informação pretendida completamente independente da descartada. Uma estratégia é seguir a hierarquia [BBGKY\[22\]](#) truncada por uma hipótese de factorização.

Estudam-se 2 equações cinéticas: a equação de Vlasov e a equação de Boltzmann. A primeira é estudada separadamente no caso de plasmas electrostáticos (Sistema Poisson-Vlasov) e no caso em que se tem em conta o campo magnético (Maxwell-Vlasov). A equação de Boltzmann é estudada para um gás de esferas rígidas.

Mostra-se que os 3 casos são exemplos de estruturas de Poisson.

Para simplificar, a partir daqui usa-se um sistema de unidades em que  $\epsilon_0 = \mu_0 = 1$ .

### 4.1 Plasmas

**Definição 4.1** (Gás). Partindo de um sistema simples, a que se chama Partícula, pode-se considerar o sistema composto por um grande número destes em interacção, a que se chama Gás.

Um *Plasma* são gases de partículas diferentes a interagirem com um campo **EM** e com um potencial colisional. Para que se possa dizer que a evolução é função exclusiva do estado, é necessário incluir os campos EM na definição de estado. Assim, tem-se um sistema com um espaço de fases de dimensão mista infinita: os graus de liberdade são dados por uma colecção numerável(gases) e por uma colecção infinita não numerável(campos).

Fixam-se as condições fronteira dos campos e assume-se que as únicas cargas do Universo são as que constituem o plasma, localizado num recipiente tendencialmente infinito.

**Definição 4.2** (Plasma). Um plasma clássico é um sistema físico clássico, com o espaço de fases contido no produto cartesiano dos espaços de fases de  $S$  gases de partículas diferentes e o espaço de fases do campo electromagnético. O estado do sistema é um vector  $(Z, E, B)$ , em que  $Z$  são as posições e velocidades de todas as partículas. A espécie  $s$  tem massa e carga  $m_s, q_s$ .

- À componente do estado do plasma dado pela componente gás chama-se  $Z \in \Theta$ , com  $\Theta = \Theta^1 \times \dots \times \Theta^S$ ,  $S$  o número de espécies
- $\Theta^s = \Gamma_1^s \times \dots \times \Gamma_{N_s}^s$ ,  $\Gamma_i^s = \Gamma$ ,  $N_s$  o número de partículas da espécie  $s$  e  $\Gamma$  é um espaço de coordenadas  $z = (x, p)$  de dimensão  $3 + 3$ ;

- $Z = (Z^c, Z^n) = (Z_1, \dots, Z_s), Z \in \Theta$ 
  - \*  $Z^c$  é o vector de coordenadas das espécies carregadas
  - \*  $Z^n$  é o vector de coordenadas das espécies neutras
- $Z_s = (z_{s1}, \dots, z_{sN_s}), Z_s \in \Theta^s$ , vector com todas as coordenadas das partículas da espécie  $s$
- $z_{si} = (x_{si}, v_{si}), z_{si} \in \Gamma_i^s$  são as coordenadas da partícula  $si$ .

A interação é dada pelos campos **EM**, através da força de Lorentz, e por uma energia potencial, relacionada com as colisões não electromagnéticas. Esta energia é dada por

$$\mathcal{V} = \sum_{s_1 s_2} \mathcal{V}^{s_1 s_2} \quad (4.3)$$

$$\mathcal{V}^{s_1 s_2}[X^n] = \sum_{ij} V^{s_1 s_2}(|x_{s_1 i} - x_{s_1 j}|) \quad (4.4)$$

onde

- $s_1, s_2$  percorrem todos os pares de espécies diferentes. Para espécies carregadas,  $\mathcal{V}^{s_1 s_2}$  é 0.
- $(i, j)$  percorre todos os pares de partículas em que uma é da espécie  $s_1$  e a outra da espécie  $s_2$ .
- $V^{s_1 s_2}$  é da forma

$$V(r) = \begin{cases} \gamma & r < r_{in} \\ g(r) & r_{in} < r < r_{out} \\ 0 & r > r_{out} \end{cases} \quad (4.5)$$

$V$  é um potencial colisional.

**Definição 4.6** (Potencial colisional). Uma função  $V : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  diz-se um **potencial colisional** se  $V$  é uma função monótona, que decai suficientemente rápido para 0 no infinito. Este suficientemente depende do sistema estudado.

As trajectórias satisfazem as equações

$$\dot{x}_{si} = v_{si}, \quad (4.7)$$

$$m_{si} \dot{v}_{si} = e_s (\tilde{E}(x_{si}) - \tilde{B}(x_{si}) \times v_{si}) - \partial_{x_{si}} \mathcal{V} \quad (4.8)$$

$$\partial_t E = \nabla \times B - J \quad (4.9)$$

$$\partial_t B = -\nabla \times E \quad (4.10)$$

$$J = \sum_{si} q_s v_{si} \delta(x - x_{si}) \quad (4.11)$$

$$\rho[X^c](x) = \sum_i q_i \delta(x - x_i) \quad (4.12)$$

, que define o campo vectorial  $\xi$ , de tal modo que se pode dizer

$$\partial_t(Z, E, B) = \xi(Z, E, B) \quad (4.13)$$

A notação dos campos  $\tilde{C}$  serve para lembrar que se remove a contribuição da partícula  $si$  quando se calcula a força de Lorentz que a actua.

As condições iniciais devem respeitar

$$\nabla \cdot B = 0 \quad (4.14)$$

$$\nabla \cdot E = \rho \quad (4.15)$$

$$(4.16)$$

**Proposição 4.17.** As 2 equações de Maxwell não dinâmicas são invariantes para a dinâmica, ou seja, se são

satisfeitas em  $t = 0$ , são satisfeitas ao longo da trajectória definida pela evolução do plasma.

*Demonstração.* Calcula-se a derivada temporal de cada uma das equações, assumindo que as condições iniciais respeitam 4.14.

$$\begin{aligned} \partial_t \nabla \cdot B &= -\nabla \cdot \nabla \times E = 0 \\ \partial_t (\nabla \cdot E - \rho) &= \nabla \cdot \nabla \times B - (\partial_t \rho + \nabla \cdot J) = -(\partial_t \rho + \nabla \cdot J) \end{aligned} \quad (4.18)$$

Campos e densidades que sejam solução das equações de Maxwell num dado instante, forçam a verificação da equação de continuidade para a carga,

$$0 = \nabla \cdot \nabla \times B = \nabla \cdot J + \partial_t E = \partial_t \rho + \nabla \cdot J \quad (4.19)$$

□

**Nota 4.20.** Uma forma de obter a força de Lorentz, com os campos  $\mathbf{\bar{b}}$ , é fazer o valor médio dos campos completos  $(E, B)$  numa superfície esférica centrada em cada ponto  $x$ , com o raio a tender para 0.

$$\tilde{E}(x) = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\int_{S_r(x)} E}{4\pi r^2} \quad \tilde{B}(x) = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\int_{S_r(x)} B}{4\pi r^2} \quad (4.21)$$

Apesar de os campos divergirem em  $r = 0$ , o valor médio não diverge: a contribuição da carga em  $x$  para o campo avaliado em  $x$  é simétrica para rotações, pelo que o seu valor médio é 0.

## 4.2 Plasma Electromagnético

Estuda-se o caso em que não há espécies neutras.

**Definição 4.22** (Plasma electromagnético). Considere-se um Plasma em que só existem espécies carregadas ( $X = X^c$ ). Nesse caso,  $\mathcal{V} = 0$  e só existem interações electromagnéticas. Chama-se a este sistema **Plasma Electromagnético**.

Imagine-se que se faz uma medição experimental do estado de um plasma, ou seja, mede-se a posição e velocidade de todas as partículas e os valores dos campos. Atribui-se a cada uma das medições da presença de uma partícula uma posição numa lista de  $N$  pares  $(x, v)$ , obtendo assim o vector  $Z$ . Se se repetir a medição noutra instante de tempo, é preciso garantir que não se altera a ordem. Ou seja, para além de se ter que fazer a medição das posições e velocidades de todas as partículas no gás, é preciso garantir que a identidade das partículas não é redefinida. Em geral, é difícil e desinteressante fazê-lo: difícil porque não é fácil distinguir partículas pontuais. Desinteressante, porque existe uma representação alternativa do plasma, que se diz de Klimontovich, para a qual os campos continuam a ser observáveis.

### 4.2.1 Sistema de Klimontovich

**Definição 4.23** (Plasma de Klimontovich). Considerem-se as  $S$  funções  $\mathcal{N}_s(x, p)$ , que representam a densidade de partículas da espécie  $s$  com posição  $x$  velocidade  $v$ :

$$\mathcal{N}_s[Z_s](z) := \sum_i^{N_s} \delta(z - z_{si}) \quad (4.24)$$

Chama-se  $\mathcal{N}$  ao vector de  $S$  funções  $\mathcal{N}_s$ .

O sistema de Klimontovich é o sistema obtido de um plasma, fazendo a tradução

$$(Z, E, B) \rightarrow (\mathcal{N}, E, B) \quad (4.25)$$

Quando se tem um observável que é uma função, usa-se a notação dos parêntesis rectos para separar a dependência do estado. Por exemplo, no caso de  $\mathcal{N}_s$  tem-se uma dependência em  $z$  e uma dependência em  $Z_s$ . A primeira usa parêntesis curvos e a segunda rectos. Ou seja, quando se tem observáveis cuja observação é uma função, as variáveis correspondentes ao espaço de fases aparecem em parêntesis rectos.

**Proposição 4.26.** *A representação motivada pela tradução de um plasma electromagnético*

$$(Z, E, B) \rightarrow (\mathcal{N}, E, B) \quad (4.27)$$

$$\cdot \quad (4.28)$$

é fiel, mas não é completa. A evolução de  $\mathcal{N}$  respeita a equação

$$0 = \left( \partial_t + v \cdot \partial_x + \frac{e_s}{m_s} (\tilde{E} - \tilde{B} \times v) \cdot \partial_v \right) \mathcal{N}_s \quad (4.29)$$

, a que se chama **Equação de Klimontovich**.

*Demonstração.* Relembra-se que os campos são graus de liberdade do sistema independentes das posições e velocidades do gás.

A evolução dos campos no sistema completo só depende da componente gás através das densidades de carga, que são funções de  $\mathcal{N}$ . Ou seja, a evolução dos campos não fica comprometida pela tradução. A dinâmica traduzida  $\phi'$  é definida por  $\phi' \circ T = \phi$ ,

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_t[Z](z) &= \mathcal{N}[Z_t](z) \\ \partial_t \mathcal{N}_t[Z](z) &= \partial_t \mathcal{N}[Z_t](z) = \partial_t Z \cdot \partial_Z \mathcal{N}[Z](z) = \\ \xi[Z, E, B] \cdot \partial_Z \mathcal{N}[Z](z) &= \sum_i \xi_i[z_i, E, B] \cdot \partial_{z_i} \delta(z - z_i) = - \sum_i \xi_i[z_i, E, B] \cdot \partial_z \delta(z - z_i) \\ &= - \sum_i \xi_i[z, E, B] \cdot \partial_z \delta(z - z_i) + \partial_z \cdot \xi_i[z, E, B] \delta(z - z_i) \\ &= -\xi_1[z, E, B] \cdot \partial_z \sum_i \delta(z - z_i) = -\xi_1[z, E, B] \cdot \mathcal{N}[Z](z) \quad , \end{aligned} \quad (4.30)$$

que é a equação de Klimontovich, fazendo a substituição  $\xi_1 = (v, \frac{e}{m} (\tilde{E} - \tilde{B} \times v))$ .  $\xi_i[z_i, E, B]$  é um vector em  $\mathbb{R}^6$ , composto pelas componentes do campo vectorial  $\xi$  na direcção das coordenadas da partícula  $z_i$ . Usou-se que  $\xi_i$  é igual a  $\xi_1$ . A divergência deste campo é 0, usando 4.32.

A representação não é completa porque a informação dos nomes das partículas foi eliminada: a partir das funções  $\mathcal{N}_s$  é impossível recuperar o vector  $Z_s$ : qualquer  $Z_s$  da forma  $(x_{\sigma_1}, v_{\sigma_1}, \dots, x_{\sigma_{N_s}}, v_{\sigma_{N_s}})$ , com  $\sigma$  uma permutação da lista  $\{1, \dots, N_s\}$  tem o mesmo  $\mathcal{N}_s$ . Ou seja,  $z \rightarrow \mathcal{N}$  não é uma bijecção e os nomes das partículas não são recuperáveis de  $\mathcal{N}_s$ . □

**Nota 4.31.** *Note-se que a derivação apresentada em [22] da equação de Klimontovich está incompleta, porque utiliza de forma errônea uma propriedade da distribuição  $\partial_z \delta(z - z_i)$ .*

**Proposição 4.32.** *A divergência em  $z$  de*

$$\xi_1(z) = \left( \frac{v}{m} (\tilde{E} - \tilde{B} \times v) \right) \quad (4.33)$$

é 0.

*Demonstração.* A divergência  $\partial_z \cdot \xi_1(z)$  é 0, já que

$$\partial_z \cdot \xi_1(z) = \partial_x \cdot v + \frac{e}{m} \partial_v \cdot (\tilde{E} - \tilde{B} \times v) \quad (4.34)$$

$$\partial_v \cdot (\tilde{E} - \tilde{B} \times v) = \partial_v \cdot (\tilde{B} \times v) \quad (4.35)$$

A divergência de um vector na forma  $A \cdot b$ , com  $A$  uma matriz e  $b$  um vector, é dado por

$$\partial_v \cdot (A \cdot b) = \partial_v \cdot A \cdot b + \text{Tr}(A \cdot \partial_v b) \quad (4.36)$$

O produto externo na força de Lorentz pode ser escrito na forma

$$\tilde{B} \times v = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -\tilde{B}_3 & \tilde{B}_2 \\ \tilde{B}_3 & 0 & -\tilde{B}_1 \\ -\tilde{B}_2 & \tilde{B}_1 & 0 \end{pmatrix}}_{\tilde{B}^\times} \cdot \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} . \quad (4.37)$$

Aplicando a divergência, fica

$$\partial_v \cdot (\tilde{B} \times v) = \text{Tr}(\tilde{B}^\times \cdot \partial_v v) = \text{Tr}(\tilde{B}^\times) = 0 . \quad (4.38)$$

□

Do ponto de vista experimental, as funções  $\mathcal{N}_s$  são muito mais acessíveis que os vectores  $Z_s$ : para as medir, basta realizar um censo sobre o domínio do plasma, ou seja, contar o número de partículas de cada espécie em cada célula  $dx dp$  no espaço  $\Gamma$ .

O espaço de  $\mathcal{N}$  admissíveis para a solução do sistema de Klimontovich é muito restrito: só contém distribuições  $\mathcal{N}_s$  cujo suporte é uma colecção de pontos com  $N_s$  elementos. O sistema de Vlasov é obtido alargando o espaço de soluções a funções  $f^s$  contínuas.

$$0 = \partial_t f^s + v \cdot \partial_x f^s + \frac{e_s}{m_s} (E - B \times p) \cdot \partial_v f^s = \mathcal{V}lasov(f^s, E, B) \quad (4.39)$$

$$\mathcal{M}axwell(f, E, B) = 0 . \quad (4.40)$$

(Usa-se a notação  $\widehat{\mathcal{M}axwell}(f, E, B) = 0$  para representar as equações de Maxwell). Para dar significado físico ao sistema existem duas estratégias diferentes, que podem ser usadas em simultâneo. Nas secções seguintes discute-se cada uma delas. A ideia é mostrar que o sistema de Vlasov é uma quase representação fiel do sistema de Klimontovich, em que o quase significa que o impedimento pode-se fazer pequeno.

## 4.2.2 Molificação

Para simplificar a notação, considere-se um gás mono específico,  $S = 1$ . Parte-se de uma solução de Klimontovich,  $(\mathcal{N}, E, B)$ . Considere-se a operação  $g \rightarrow \hat{g}$ ,  $\hat{g} = \sigma * g$ , em que  $*$  é a convolução, definida por

$$a * b(x, v) = \int_{\Omega} a(x - x_0, v - v_0) b(x_0, v_0) dx_0 dv_0 , \quad (4.41)$$

e  $\sigma$  é um molificador(molifier) ou filtro[23]. Intuitivamente, a convolução com  $\sigma$  elimina as arestas de  $\mathcal{N}$ , substituindo cada uma das funções delta por uma cópia da função  $\sigma$ , centrada no suporte da função delta. As propriedades que se exigem de  $\sigma$  são

$$\sigma(x, v) = \sigma_x(x) \sigma_v(v) , \quad \int_{\Gamma} \sigma = 1 \quad (4.42)$$

$$\int_{\Gamma} \sigma x = 0 , \quad \int_{\Gamma} \sigma v = 0 \quad (4.43)$$

Se a função só depender de  $x$  ou de  $v$ , a operação  $\hat{\bullet}$  utiliza como molificador  $\sigma_x$  ou  $\sigma_v$ , respectivamente. Considere-se  $(\widehat{\mathcal{N}}, \widehat{E}, \widehat{B}) = (\hat{\mathcal{N}}, \hat{E}, \hat{B})$ .

É útil definir

$$\Delta : \Delta a = a - \hat{a} . \quad (4.44)$$

Em particular, é claro que  $\widehat{\Delta a} = 0, \forall a$ . A suavização do produto de duas funções é

$$\widehat{a \cdot b} = \hat{a} \hat{b} + \Delta a \Delta b . \quad (4.45)$$

**Proposição 4.46.** *Considere-se a tradução do sistema de Klimontovich dada por*

$$(\mathcal{N}, E, B) \rightarrow (\widehat{\mathcal{N}}, \widehat{E}, \widehat{B}) \quad (4.47)$$

em que  $\hat{\bullet}$  é uma operação de molificação. A representação motivada por esta tradução é quase fiel. Seria fiel se

$$\frac{e_s}{m_s} - (\Delta E - \Delta B \times v) \cdot \partial_v \Delta f = 0, \forall t \quad (4.48)$$

*Demonstração.* A ideia é inserir o estado suavizado no sistema de Vlasov, e ver quão longe está de ser solução. Usa-se a notação  $\text{Maxwell}(f, E, B) = 0$  para o sistema de equações de Maxwell, e  $\text{Vlasov}(f, E, B) = 0$  para a equação de Vlasov.

Começa-se por analisar  $\text{Maxwell}(\hat{f}, \hat{E}, \hat{B})$ . A convolução comuta com as derivadas espaciais, ou seja,  $\partial_z(a*b) = a*\partial_z b$ . Como  $\sigma$  é independente do tempo, a molificação comuta com as derivadas temporais:  $\partial_t(\sigma*b) = \sigma*\partial_t b$ . As densidades de carga e corrente  $\rho[\hat{f}], J[\hat{f}]$  são dadas por

$$\rho[\hat{f}] = \sigma_x * \int_v \sigma_v * f = \sigma_x * \int_v f = \sigma_x * \rho[f] \quad (4.49)$$

$$J[\hat{f}] = \sigma_x * \int_v v \sigma_v * f = \sigma_x * \int_v \sigma_v * v f = \sigma_x * J[f] \quad (4.50)$$

Usando ainda a linearidade das equações de Maxwell nos campos e nas densidades, fica

$$\text{Maxwell}(\hat{f}, \hat{E}, \hat{B}) = \sigma_x * \text{Maxwell}(f, E, B) = 0 \quad (4.51)$$

Agora, analisa-se  $\text{Vlasov}(\hat{f}, \hat{E}, \hat{B})$ . Verifica-se que os campos  $\hat{\bullet}$  suavizados correspondem aos campos totais suavizados: a contribuição da densidade de carga presente num dado ponto para os campos totais suavizados é 0, porque a densidade já não diverge. Usando a suavização de produtos,

$$\begin{aligned} & \partial_t \sigma * f + v \cdot \partial_x \sigma * f + \frac{e_s}{m_s} \sigma * (E - B \times v) \cdot \partial_v \sigma * f = \\ & \partial_t f + \sigma * (v \cdot \partial_x f) + \frac{e_s}{m_s} (E - B \times v) \cdot \partial_v f = \\ & \sigma * \left( \partial_t f + v \cdot \partial_x f + \frac{e_s}{m_s} (E - B \times v) \cdot \partial_v f \right) - \frac{e_s}{m_s} (\Delta E - \Delta B \times v) \cdot \partial_v \Delta f \\ & \iff \\ & \text{Vlasov}(\hat{f}, \hat{E}, \hat{B}) = \sigma * \text{Vlasov}(f, E, B) - \frac{e_s}{m_s} (\Delta E - \Delta B \times v) \cdot \partial_v \Delta f \iff \\ & \text{Vlasov}(\hat{f}, \hat{E}, \hat{B}) = -\frac{e_s}{m_s} (\Delta E - \Delta B \times v) \cdot \partial_v \Delta f \quad . \end{aligned} \quad (4.52)$$

□

As equações de Maxwell são satisfeitas pelos campos suavizados. A equação de Vlasov não, sendo que o que impede a solução molificada de ser solução é o termo  $\frac{e_s}{m_s} (\Delta E - \Delta B \times v) \cdot \partial_v \Delta f$ . Do ponto de vista físico, espera-se que para suavizações fracas (molificadores com uma largura pequena) este termo seja pequeno, já que fazendo o limite em que a largura vai para 0 recupera-se uma solução de Klimontovich. Caso o número de partículas seja muito elevado e a distância média entre partículas seja pequena, uma molificação fraca pode ser suficiente para eliminar as variações microscópicas da solução de Klimontovich. Nesse caso, obtém-se que a função molificada é uma função suave e ao mesmo tempo solução do sistema. Ou seja, trata-se de uma solução do sistema de Vlasov. A molificação permite portanto imbuir de significado físico algumas soluções do sistema de Vlasov: pode-se pensar que são molificações de soluções do sistema de Klimontovich, em que se pode desprezar o termo  $\frac{e_s}{m_s} (\Delta E - \Delta B \times v) \cdot \partial_v \Delta f$ .

Em [22] encontram-se argumentos físicos para estimar a qualidade desta aproximação.

### 4.2.3 Ensemble Electromagnético

Outra forma de obter o sistema Maxwell-Vlasov é usar a linguagem da física estatística. Estuda-se um sistema físico estatístico, associado a um plasma. Os plasmas têm um espaço de fases complicado, já que os campos fazem parte do estado e são um contínuo de graus de liberdade. É possível parametrizar

as componentes dos campos com uma série numerável de coordenadas, de tal forma que se obtém um sistema Hamiltoniano de dimensão infinita[24]. Ao ensemble neste espaço chama-se **Ensemble Electromagnético**.

Espera-se que o espaço de fases possa ser parametrizado pelas coordenadas do gás e pelas coordenadas dos campos, a que se chamam coordenadas  $Y$ . Espera-se também que exista uma medida  $\mu^e$  com as propriedades exigidas pela definição de sistema estatístico 2.69. Nesse caso, obtém-se a equação de continuidade, usando a hipótese de conservação de probabilidade e escolhendo um ensemble  $\mu = f^b \mu^e$ :

$$\partial_t f^b + \partial_Z \cdot (f^b \xi) + \partial_Y \cdot (f^b \xi) = 0 \quad , \quad (4.53)$$

onde  $\xi$  é o vector velocidade no espaço de fases. Tem como componentes as velocidades de todas as partículas, as forças aplicadas a todas as partículas e ainda as velocidades das coordenadas dos campos. É função de todo o estado do sistema, ou seja, de todas as coordenadas do espaço de fases.

Quer-se estudar o valor esperado do observável "densidade de partículas em  $(x, p)$ ". Este observável é uma função.

Obtém-se o valor esperado fazendo  $\mu(\mathcal{N})$ , ou seja,

$$\mu(\mathcal{N}) = \langle \mathcal{N} \rangle_\mu = \int_{\Omega} \mathcal{N} \mu = \sum_i^N f^{(k)} = f \quad (4.54)$$

Chama-se a  $f^{(k)}$  funções marginal da partícula  $k$ . Quer-se obter como é que a função  $\langle \mathcal{N} \rangle_\mu$  evolui no tempo. A estratégia é integrar a equação de continuidade em subconjuntos do espaço de fases, de tal forma que se obtenha a derivada temporal de cada uma das funções  $f^{(k)}$ .

Considerem-se os domínios

$$\Omega_{\{k\}} = \Gamma_1 \times \dots \underbrace{\{(x, p)\}}_k \times \dots \Gamma_N \times \Omega_{\text{campos}} \quad . \quad (4.55)$$

$\Omega_{\{k\}}$  é a "folha" no espaço de fases em que as coordenadas da partícula  $k$  estão fixas em  $z = (x, p)$ . Lembra-se que  $\Gamma_i$  é o espaço de coordenadas da partícula  $i$ .

Faz-se o integral da equação de continuidade em  $\Omega_{\{k\}}$ :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_{\{k\}}} \partial_t f^b + \partial_Z \cdot (f^b \xi) + \partial_Y \cdot (f^b \xi) &= 0 \\ \partial_t f^{(k)} + \partial_{z_k} \cdot \left( \int_{\Omega_k} f^b \xi_k \right) + \underbrace{\int_{\Omega_k} \partial_Y \cdot (f^b \xi)}_0 &= 0 \quad , \quad (4.56) \end{aligned}$$

onde se usou o teorema de Gauss para eliminar as divergências nas coordenadas das partículas  $\neq i$  e nas coordenadas dos campos. Assumem-se condições fronteira para  $f$  tais que o fluxo numa esfera de raio tendencialmente infinito é 0. Para as coordenadas do gás, a hipótese é fisicamente clara e é standard em derivações deste tipo[22]. Para as coordenadas  $Y$ , assume-se a sua validade sem nenhum argumento que não a utilidade.

$\xi$  é dado por

$$\xi_k = (v_k, F_k) \quad (4.57)$$

$$F_k = q(\tilde{E} - v_k \times \tilde{B}) \quad (4.58)$$

Os campos  $E, B$  são observáveis com a particularidade de serem funções do espaço.

$$E(x) = E[Y](x) \quad (4.59)$$

$$B(x) = B[Y](x) \quad . \quad (4.60)$$

A aplicação dos campos  $\tilde{E}, \tilde{B}$  a uma posição  $x$  depende do nome da partícula que a ocupa,

$$\tilde{E}(x_k) = \tilde{E}_k[Y](x_k) \quad (4.61)$$

$$\tilde{B}(x_k) = \tilde{B}_k[Y](x_k) \quad (4.62)$$

Os campos  $\tilde{E}_k$  servem para ter isso em conta. Na força de Lorentz que aparece em 4.56, os campos  $\tilde{C}$  são  $\tilde{C}_k$ . Naturalmente, a força de Lorentz sobre a partícula  $k$  depende das coordenadas  $x_k, v_k$ , mas a dependência resulta apenas da aplicação da fórmula da força ao ponto no espaço  $\Gamma$  em que a partícula se encontra. Ou seja, é uma dependência () e não uma dependência [].

Definem-se as médias marginais,

$$\langle a \rangle_{\mu i} [z] = \langle a \rangle_i [z] = \frac{\int_{\Omega_{(k)}} a \mu}{\int_{\Omega_{(k)}} \mu} = \frac{\int_{\Omega_{(k)}} a \mu}{f^{(k)}(z)} \quad (4.63)$$

Integrando a equação de continuidade em  $\Omega_k$ ,

$$\partial_t f^{(k)} + \partial_x \cdot \left( \int_{\Omega_{(k)}} \mu v \right) + \partial_v \cdot \left( \int_{\Omega_{(k)}} \mu F_i \right) = 0 \quad (4.64)$$

$$\partial_t f^{(k)} + v \cdot \partial_x f^{(k)} + \partial_v \cdot \left( f^{(k)} \langle q(\tilde{E}_k - v \times \tilde{B}_k) \rangle_k \right) = 0 \quad (4.65)$$

Para não sobrecarregar a notação, omitiram-se as posições em que os campos estão aplicados e as coordenadas da partícula 1 escolhidas na média. A força eléctrica que aparece na equação escreve-se explicitamente

$$\langle \tilde{E}_1 \rangle_1 = \langle \tilde{E}_1 \rangle_1 [x, v](x) \quad (4.66)$$

Observa-se que  $\mathcal{N}$  é insensível a permutações de partículas. Ou seja, se se aplicar a permutação das partículas  $(ij)$ ,  $P_{ij}$ , ao espaço de fases, o observável  $\mathcal{N}'[Z] = \mathcal{N}[P_{ij}(Z)]$  é igual a  $\mathcal{N}[Z]$ . Fazendo  $f^b \rightarrow f^b \circ P_{ij}$ ,

$$f^{(i)} \rightarrow f^{(j)}, f^{(j)} \rightarrow f^{(i)} \quad (4.67)$$

$$f \rightarrow f \quad (4.68)$$

Substituindo  $f^b \rightarrow \frac{1}{\binom{N}{2}} \sum_{P_{ij}} f^b \circ P_{ij}$ , obtém-se um ensemble simétrico e normalizado a 1.

**Hipótese 4.69.** *Seja  $P_{ij}$  a permutação das partículas  $(ij)$ . Então,*

$$\mu = \mu \circ P_{ij} \quad (4.70)$$

**Proposição 4.71.** *A tradução*

$$f^b \rightarrow \frac{1}{\binom{N}{2}} \sum_{P_{ij}} f^b \circ P_{ij} \quad (4.72)$$

*resulta numa representação fiel, mas não completa. O valor esperados  $\langle \mathcal{N} \rangle$  é invariante para a tradução.*

*Demonstração.* A evolução do novo sistema é dada pela simetrização da equação de continuidade, e torna a representação claramente fiel. O valor esperado transforma-se em

$$\langle \mathcal{N} \rangle' = \int_{\Omega} \mathcal{N} \frac{1}{\binom{N}{2}} \sum_{P_{ij}} f^b \circ P_{ij} \quad (4.73)$$

$$\langle \mathcal{N} \rangle' = \frac{1}{\binom{N}{2}} \sum_{P_{ij}} \int_{P_{ij}(\Omega)} \mathcal{N} \circ P_{ij} f^b \quad (4.74)$$

, onde se usou que  $P_{ij}$  é uma transformação unitária.  $\mathcal{N}$  é claramente simétrico para trocas de partículas:

$$\mathcal{N} \circ P_{ij} = \sum_i \delta_{z_{\sigma_i}} = \sum_i \delta_{z_i} = \mathcal{N} \quad (4.75)$$



$\Omega$  também é simétrico. Logo, fica

$$\langle \mathcal{N} \rangle' = \frac{1}{\binom{N}{2}} \sum_{P_{ij}} \int_{\Omega} \mathcal{N} f^b = \frac{\binom{N}{2}}{\binom{N}{2}} \int_{\Omega} \mathcal{N} f^b = \langle \mathcal{N} \rangle \quad . \quad (4.76)$$

Os campos são insensíveis à tradução, porque são independentes de  $Z$ . A evolução dos campos só depende de  $Z$  através das densidades, que são funções de  $\mathcal{N}$ . Como  $\mathcal{N}$  é invariante, a dinâmica dos campos também é invariante.  $\square$

No caso simétrico, as funções marginais e os valores esperados marginais dos campos ficam independentes de  $k$ ,

$$f^{(k)} = f^{(1)} \quad (4.77)$$

$$\langle \tilde{E}_k \rangle_k = \langle \tilde{E}_1 \rangle_1 \quad . \quad (4.78)$$

Em particular,  $f = N f^{(1)}$ .

Somando as equações obtidas para cada  $f^{(k)}$ ,

$$\partial_t f + v \cdot \partial_x f + \frac{q}{m} \partial_v \cdot \left( \left\langle f(E \tilde{x})_1(x) - v \times \tilde{B}_1(x) \right\rangle_1 \right) = 0 \quad , \quad (4.79)$$

Expandindo a divergência  $\partial_v \cdot$ ,

$$\partial_t f + v \cdot \partial_x f + \frac{q}{m} \left\langle \tilde{E}_1(x) - v \times \tilde{B}_1(x) \right\rangle_1 \cdot \partial_v f = -\frac{q}{m} f \partial_v \cdot \left\langle \tilde{E}_1(x) - v \times \tilde{B}_1(x) \right\rangle_1 \quad . \quad (4.80)$$

Os campos totais e exteriores à partícula 1 verificam

$$\text{Maxwell}(\mathcal{N}, E, B) = 0 \quad (4.81)$$

$$\text{Maxwell}(\mathcal{N} - \delta(z - z_1), \tilde{E}_1, \tilde{B}_1) = 0 \quad . \quad (4.82)$$

Calculando o valor esperado,

$$\text{Maxwell}(f, \langle E \rangle, \langle B \rangle) = 0 \quad (4.83)$$

$$\frac{(N-1)}{N} \text{Maxwell}(f, \langle \tilde{E}_1 \rangle, \langle \tilde{B}_1 \rangle) = 0 \quad , \quad (4.84)$$

onde se usa a linearidade das equações de Maxwell e a hipótese de simetria de  $f^b$ .

Fazendo  $\frac{(N-1)}{N} \approx 1$ , obtém-se que

$$\langle \tilde{E}_1 \rangle = \frac{N-1}{N} \langle E \rangle \approx \langle E \rangle \quad . \quad (4.85)$$

Considere-se a seguinte hipótese:

**Hipótese 4.86.** *O ensemble inicial factoriza,*

$$f^b(z_1 \dots z_k, Y) = \prod_{i=1}^N f^1(z_i) f^Y(Y) \quad , \quad (4.87)$$

e mantém-se aproximadamente factorizado  $\forall t$ .

Nesse caso,  $\langle \tilde{E} \rangle_1$  é independente das coordenadas da partícula 1:

$$\langle \tilde{E}_1[Y] \rangle_1 = \frac{\int_{\Omega_1} \tilde{E}_1[Y] \mu}{f^{(k)}} = \int_{\Omega_i} \tilde{E}_1[Y] \prod_{i \neq 1}^N f^1(z_i) f^Y(Y) \quad . \quad (4.88)$$

A média total coincide com a média marginal,

$$\langle \tilde{E}_1 \rangle = \int_{\Gamma_1} f^1 \langle \tilde{E}_1 \rangle_1 = \langle \tilde{E}_1 \rangle_1 \int_{\Gamma_1} f^1 = \langle \tilde{E}_1 \rangle_1 \quad . \quad (4.89)$$

Da mesma forma, obtém-se que

$$\langle \tilde{B} \rangle_1 = \langle B \rangle \quad . \quad (4.90)$$

O lado direito de 4.80 fica 0:

$$\partial_v \cdot \langle \tilde{E}_1(x) + v_1 \times \tilde{B}_1(x) \rangle_1 = \partial_v \cdot \left( \langle \tilde{E}_1 \rangle(x) + v \times \langle \tilde{B}_1 \rangle(x) \right) \quad (4.91)$$

$$= \partial_v \cdot (v \times \tilde{B}_1(x)) = 0 \quad . \quad (4.92)$$

A componente  $x$  de  $v \times \tilde{B}_1(x)$  só depende das componentes  $y, z$ . O mesmo para as outras componentes. Portanto, a divergência em  $v$ , é 0.

Fazendo as substituições em 4.80, obtém-se a equação de Vlasov.

**Proposição 4.93.** *Considere-se a tradução do de um sistema estatístico associado a um plasma electromagnético, dada por*

$$(\mu^b, E, B) \rightarrow (\langle \mathcal{N} \rangle_{\mu^b}, \langle E \rangle_{\mu^b}, \langle B \rangle_{\mu^b}) \quad (4.94)$$

*A tradução não resulta numa interpretação fiel. Se a hipótese 4.86 se verificar, então a representação é fiel e é equivalente ao sistema de Maxwell-Vlasov.*

*Demonstração.* Resulta directamente da discussão anterior. □

### 4.3 Plasma Hamiltoniano

No caso de um plasma em que se assume  $B = 0$ , os campos podem ser eliminados do estado. As posições e velocidades das partículas são suficientes para determinar a sua evolução. Utilizando a definição de plasma 4.2, um plasma electrostático é equivalente a adicionar ao potencial  $\mathcal{V}$  os potenciais electrostáticos entre partículas carregadas e a eliminar os campos do estado. Para simplificar, considera-se que o potencial de colisão não depende das espécies.

**Definição 4.95** (Plasma Hamiltoniano). Chama-se **plasma Hamiltoniano** a um sistema Hamiltoniano com

- $\Omega = \Theta_{xp}$ ,  $\Theta_{xp}$  é o espaço das posições e momentos de todas as partículas, com a correspondência  $p = mv$ .
- $\mathcal{H}(Z) = \mathcal{F}(P) + \mathcal{V}(X)$ 
  - $\mathcal{V}(X) = \mathcal{V}_{\text{col}}(X^n) + \Phi(X^c)$ 
    - \*  $\mathcal{V}_{\text{col}} = \sum_{ij} V(|x_i - x_j|)$
    - \*  $\Phi = \sum_{ij} q_i q_j \frac{1}{|x_i - x_j|}$
  - $\mathcal{F}(P) = \sum_i p_i^2 / 2m$
  - $\xi = X_{\mathcal{H}}$ , velocidade no espaço de fases

**Proposição 4.96.** *O plasma Hamiltoniano é uma representação completa de um plasma, caso  $B = 0 \forall t$ . A tradução é*

$$(Z_{xv}, E, B) \rightarrow Z_{xp} \quad (4.97)$$

Para simplificar, faz-se  $Z = Z_{xp}$ .

*Demonstração.*  $Z_{xp}$  é obtido transformando cada uma das velocidades no momento correspondente,  $p_{si} = m_s v_{si}$ , que é claramente uma operação invertível.

Quando  $B = 0$ , o campo  $E$  é dado por  $-\nabla\phi$ , com

$$\phi[X](x) := \sum_i q_i \frac{1}{|x_i - x|} \quad . \quad (4.98)$$

Pode-se eliminar  $B$  do estado porque se assume que é  $0 \forall t$ . Pode-se eliminar  $E$  do estado, porque nestas condições a equação de Maxwell  $\nabla \cdot E = \rho$  pode ser usada para transformar  $E$  numa função de  $X$ . O campo que actua a partícula  $i$  é  $-\nabla\tilde{\phi}_i$

$$\tilde{\phi}_i[X](x) = \sum_{j \neq i} q_j \frac{1}{|x_j - x|} \quad . \quad (4.99)$$

$F_i^c$ , a força de Lorentz sobre a partícula  $i$ , é  $-q_i \nabla \tilde{\phi}_i(x_i)$ .

$$\Phi(X^c) = \sum_{i \neq j} q_i q_j \frac{1}{|x_i - x_j|} \quad (4.100)$$

As forças sobre as partículas são dadas por

$$F_i^c = \{x_i, \Phi(X^c) + \mathcal{V}_{\text{col}}\} \quad . \quad (4.101)$$

A evolução de  $Z_{xp}$  passa a ser função exclusiva de  $Z_{xp}$ . □

Um ensemble deste plasmas é um ensemble de um sistema Hamiltoniano com espaço de fases de dimensão finita  $\Omega$ , antigo  $\Theta$ . Neste caso, existe outra estratégia para obter uma equação para a evolução de  $f$ , a que se chama hierarquia **BBGKY** [22]. Obtém-se a dinâmica das  $N$  funções marginais, definidas por

$$f^n = \int_{\Omega_{n+1} \dots \Omega_N} \mu \quad . \quad (4.102)$$

Diz-se hierarquia porque

$$\partial_t f^n = O(f^n, f^{n+1}) \quad . \quad (4.103)$$

A função marginal  $f^1$  pode ser identificada com a função de distribuição  $f$ . Nesta secção, estuda-se a equação da hierarquia para  $f^1$  e obtém-se a sua relação com a função  $f$ .

### 4.3.1 Hierarquia **BBGKY**

Para simplificar, toma-se um plasma com  $S = 1$ . A generalização é directa.

Partindo do ensemble  $\mu = f^N \mu^w$  ( $b$  de "big", para distinguir esta função do espaço de fases da função de distribuição  $f$ ), definem-se as funções

**Definição 4.104** (Funções marginais  $K$ ).

$$f^K : \Gamma_{i_1} \times \dots \times \Gamma_{i_k} \rightarrow \mathbb{R}$$

$$f^K = \int_{\Omega_K} \mu = \int_{\Gamma_{m_1}} \dots \int_{\Gamma_{m_{N-k}}} \mu \quad , \quad (4.105)$$

em que  $K$  é um subconjunto de  $\{1 \dots N\}$  com  $k$  elementos.  $\tilde{K}$  é o complementar. Os índices  $\{m_i\}$  são os elementos de  $\tilde{K}$ .

Estas funções são as densidade de probabilidades das variáveis aleatórias "posição da partícula  $i_1, \dots, i_k$ ".

Quer-se utilizá-las para construir a função de distribuição, que é o valor esperado do observável "densidade do número de partículas em  $(x, p) \in \Gamma$ ",  $\mathcal{N}[Z](x, p)$ .

Considere-se um volume  $V \in \Gamma$ . Define-se a variável aleatória  $N_V$  "número de partículas em  $V$ ".

**Proposição 4.106.**

$$\langle N_V \rangle = \sum_i \int_V f^{(i)} \quad (4.107)$$

*Demonstração.*

$$\langle N_V \rangle = \sum_i \int_V f^{(i)} = \sum_i \int_{O_{(i)}} \mu \quad (4.108)$$

Considere-se  $Z \in \Omega$ , um ponto para o qual  $N_V(Z) = m$ , ou seja, estão  $m$  partículas em  $V$ . Nesse caso, existem exactamente  $m$  valores de  $i$  no somatório para os quais o integral correspondente inclui o ponto  $Z$ . Ou seja, a contribuição para a soma de cada ponto  $Z$  é proporcional ao valor de  $N_V(Z)$ . A soma de integrais pode ser substituída por um único integral, desde que a integranda seja multiplicada por  $N_V(Z)$ :

$$\sum_i \int_{\{i\}} \mu = \int_{\Omega} N_V(Z) \mu = \langle N_V \rangle \quad (4.109)$$

□

**Proposição 4.110.**

$$f = \langle \mathcal{N} \rangle = \sum_{i=1}^N f^{(i)} \quad (4.111)$$

*Demonstração.* Verificou-se que

$$\langle N_V \rangle = \int_V \sum_{\{i\}} f^{(i)} \quad (4.112)$$

Pela definição de  $f$ ,

$$\int_V f = \langle N_V \rangle = \int_V \sum_{\{i\}} f^{(i)} \quad (4.113)$$

Obtêm-se o resultado usando a arbitrariedade do volume  $V$  e a continuidade de  $\mu$ .

□

**Nota 4.114.** O valor esperado de  $\mathcal{N}$  já tinha sido obtido na secção anterior, partindo directamente da definição de  $\mathcal{N}$  como uma soma de funções  $\delta$ . Como o resultado pode parecer estranho por ser dado por uma soma de probabilidades, apresenta-se esta derivação alternativa.

Quer-se agora obter a derivada temporal de  $f$ . É aqui que se segue uma estratégia semelhante à da hierarquia. Admite-se a seguinte hipótese[22]:

**Hipótese 4.115.** Seja  $P_{ij}$  a permutação das partículas  $(ij)$ . Então,

$$\mu = \mu \circ P_{ij} \quad (4.116)$$

Neste caso, muitas das funções marginais passam a ser iguais. Se  $K$  e  $K'$  são dois conjuntos com o mesmo número de elementos,

$$f^K = f^{K'} \quad (4.117)$$

Define-se assim

**Definição 4.118** (funções marginais  $k$ ).

$$f^k = \int_{\Gamma_{k+1}} \dots \int_{\Gamma_N} \mu =: \int_{\Omega_k} \mu = f^K \quad (4.119)$$

Em particular, os termos somados na equação para  $f$  passam a ser todos iguais:

$$f = \sum_{i=0}^N f^{(i)} = N f^1 \quad . \quad (4.120)$$

Ou seja, a hipótese 4.115 permite fazer a identificação da função de distribuição  $f$  com  $f^1$ . Neste caso pode-se dizer que função marginal  $f^1$  é o valor esperado da densidade de partículas, normalizado a 1.

Para obter a evolução de  $f$ , usa-se a última equação da hierarquia (A primeira é a equação de Liouville).

**Proposição 4.121.** *Admitindo que o fluxo de probabilidade no infinito é 0 e que  $\mu$  é simétrico para permutações, a função de distribuição  $f = N f^1$  respeita a equação*

$$\partial_t f^1 + v \cdot \partial_x f^1 = -(N-1) \int_{\Gamma_2} \{f^2, V_{12}\} \quad (4.122)$$

onde  $\{\bullet, \bullet\}$  é o parêntesis de Poisson nas coordenadas 1.

*Demonstração.* Integra-se a equação de continuidade de  $\mu = f^N \mu^w$  em  $\Omega_1$

$$0 = \int_{\Omega_1} \partial_t f^N + \partial_Z \cdot (\xi f^N) \quad (4.123)$$

$$(4.124)$$

Utilizando o teorema de Gauss e as condições fronteira para  $f^N$ , só sobrevive a divergência em  $z_1$ ,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_1} \partial_t f^N + \partial_{z_1} \cdot (\xi_1 f^N) &= 0 \\ \int_{\Omega_1} \partial_t f^N + \{f^N, \mathcal{H}\} + f^N \underbrace{\partial_{z_1} \cdot \xi_1}_0 &= 0 \\ \int_{\Omega_1} \partial_t f^N + \{f^N, \mathcal{T}\} &= - \int_{\Omega_1} \{f^N, \mathcal{H}\} \end{aligned} \quad (4.125)$$

, onde se usou que  $\xi$  é o campo vectorial Hamiltoniano de  $\mathcal{H}$ .

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_1} \partial_t f^N + \{f^N, \mathcal{T}\}_1 &= \partial_t f^1 + \{f^1, \mathcal{T}\}_1 \\ \int_{\Omega_1} \{f^N, \mathcal{T}\}_1 &= \sum_j \int_{\Omega_1} \{f^N, V_{1j}\}_1 \end{aligned} \quad (4.126)$$

O domínio de integração,  $\mu$  e  $\mathcal{H}$  são simétricos para permutações de 2 partículas que não sejam a 1. Logo,

$$\sum_j \int_{\Omega_1} \{f^N, V_{1j}\}_1 = \sum_{j \neq 1} \int_{\Omega_1} \{f^N, V_{12}\}_1 = (N-1) \int_{\Omega_1} \{f^N, V_{12}\} \quad (4.127)$$

$$= (N-1) \int_{\Gamma_2} \{f^2, V_{12}\} \quad (4.128)$$

$$\partial_t f^1 + \{f^1, \mathcal{T}\}_1 = -(N-1) \int_{\Gamma_2} \{f^2, V_{12}\} \quad (4.129)$$

$$\partial_t f^1 + v_1 \cdot \partial_{x_1} f^1 = -(N-1) \int_{\Gamma_2} \{f^2, V_{12}\} \quad (4.130)$$

□

No caso em que  $f^N$  só tem suporte sobre um ponto, todas as funções marginais factorizam:

$$f^N(Z) = \delta(Z - Z^0) = \prod_{i=0}^N \delta(z_i - z_i^0) \quad (4.131)$$

$$f^k(z_1 \dots z_k) = \int_{\Omega_k} \delta(Z - Z^0) = \prod_{i=0}^k \delta(z_i - z_i^0) = \prod_{i=0}^k f^1(z_i) \quad (4.132)$$

$$f^2(z_1, z_2) = f^1(z_1)f^1(z_2) \quad (4.133)$$

Para um ensemble geral, isto não é verdade. As funções marginais podem ser escritas pondo em evidência o que as impede de factorizar, através expansão em cluster de Mayer ("Mayer cluster expansion") [22]. No caso da função  $f^2$ , faz-se  $f^2(z_1, z_2) = f^1(z_1)f^1(z_2) + g(z_1, z_2)$ . Esta expansão permite reescrever a equação obtida para a dinâmica de  $f^1$ .

**Proposição 4.134.** *A evolução da função de distribuição  $f = Nf^1$  de um plasma Hamiltoniano é dada por*

$$\partial_t f^1 + \{f^1, \mathcal{H}\} = -(N-1) \int_{\Gamma_2} \{g, V_{12}\} \quad (4.135)$$

Com

$$\mathcal{H}(x_1, p_1) = p_1^2/2m + \mathcal{V}(x_1) \quad (4.136)$$

$$\mathcal{V}(x_1) = (N-1) \int_{\Gamma_2} f^1(z_2)V_{12} \approx \int_{x_2} \rho V_{12} \quad (4.137)$$

*Demonstração.* Usando 4.129 e expandindo  $f^2$ ,

$$\partial_t f^1 + \{f^1, \mathcal{T}\}_1 + (N-1) \int_{\Gamma_2} f^1(z_2) \{f^1, V_{12}\} = -(N-1) \int_{\Gamma_2} \{g, V_{12}\} \quad (4.138)$$

$$\partial_t f^1 + \{f^1, \mathcal{T}\}_1 + \left\{ f^1, (N-1) \int_{\Gamma_2} f^1(z_2)V_{12} \right\} = -(N-1) \int_{\Gamma_2} \{g, V_{12}\} \quad (4.139)$$

$$\partial_t f^1 + \left\{ f^1, p_1^2/2m + (N-1) \int_{\Gamma_2} f^1(z_2)V_{12} \right\} = -(N-1) \int_{\Gamma_2} \{g, V_{12}\} \quad (4.140)$$

Se se fizer  $g = 0$ , o resultado é uma equação de potencial médio.

$$\mathcal{V} = (N-1) \int_{\Gamma_2} f^1(z_2)V_{12} \approx \int_{\Gamma_2} f(z_2)V_{12} = \int_{x_2} \rho V_{12} \quad (4.141)$$

A aproximação é tendencialmente perfeita, já que  $\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N}{N-1} = 1$ . □

## 4.4 Maxwell-Vlasov

**Definição 4.142.** O sistema Maxwell-Vlasov é um sistema físico com estado dado por  $(f^v, E, B)$ , onde  $f^v$  é uma densidade no espaço  $(x, v)$ . As trajectórias verificam

$$\partial_t f^v + v \cdot \partial_x f^v + \frac{q}{m} (E + v \times B) \cdot \partial_v f^v = 0 \quad (4.143)$$

$$\partial_t B = -\nabla \times E \quad (4.144)$$

$$\partial_t E = \nabla \times B - J \quad (4.145)$$

$$J = q \int_v f^v v \quad , \quad \rho = q \int_v f^v \quad (4.146)$$

As condições iniciais são escolhidas de modo a verificar

$$\begin{cases} \nabla \cdot B = 0 \\ \nabla \cdot E = \rho \end{cases}, \quad t = 0 \quad . \quad (4.147)$$

**Proposição 4.148.** *O sistema de Maxwell-Vlasov é equivalente um sistema de Poisson, com estado dado por  $(f, E, A)$ ,  $f$  função do espaço  $(x, p)$ , e*

$$\{\{F, G\}\}_{fAE} = \{\{F, G\}\}_f + \{\{F, G\}\}_{EA} := \int_{xp} f \{\partial_f F, \partial_f G\} + \int_x \partial_E F \cdot \partial_A G - \partial_A F \cdot \partial_E G \quad (4.149)$$

$$\begin{aligned} H(f, A, E) &:= \frac{1}{2} \int_{x,p} f m |v|^2 + \frac{1}{2} \int_x |E|^2 + |\nabla \times A|^2 \\ &= \int_{x,p} f \mathcal{H} + \frac{1}{2} \int_x |E|^2 + |\nabla \times A|^2 \end{aligned} \quad (4.150)$$

e as identificações

$$p = mv + qA \quad (4.151)$$

$$B = \nabla \times A \quad . \quad (4.152)$$

*Demonstração.* As derivadas funcionais, definidas em 2.51, são usadas aqui num sentido mais geral. Neste caso, os observáveis são função de  $1 + 3 + 3$  funções diferentes,  $(f, E, A)$ . As derivadas funcionais passam a ser parciais, em ordem a cada uma destas componentes. O espaço base  $\Gamma$  de cada uma destas derivadas parciais é dado pelo espaço dos argumentos da componente respectiva. Ou seja,  $\partial_f$  usa o espaço das posições e momentos e  $\partial_A, \partial_E$  usam o espaço das posições.

Por exemplo, considere-se o funcional

$$G(f, E, A) = \int f g dx dp + \int h A \cdot A dx \quad (4.153)$$

Neste caso,

$$\partial_f G = g \quad (4.154)$$

$$\partial_A G = hA \quad (4.155)$$

Os integrais nas definições acima podem ser rescritos com a notação do produto interno como definido em 2.59. Para os integrais em  $xp$ ,

$$\langle f, g \rangle = \int f g dx dp \quad . \quad (4.156)$$

Para os integrais em  $x$ ,

$$\langle f, g \rangle = \int f g dx \quad . \quad (4.157)$$

Fica então

$$\{\{F, G\}\}_f = \langle f, \{\partial_f F, \partial_f G\} \rangle \quad (4.158)$$

$$\{\{F, G\}\}_{EA} = \langle \partial_E F, \partial_A G \rangle - \langle \partial_A F, \partial_E G \rangle \quad (4.159)$$

$$H(f, A, E) = \frac{1}{2} (m \langle f v, v \rangle + \langle \nabla \times A, \nabla \times A \rangle + \langle E, E \rangle) \quad (4.160)$$

Apesar de existirem 2 produtos internos diferentes, é possível recuperar o seu significado olhando para os domínios das funções internadas. A vantagem desta notação é que torna mais simples fazer as derivadas funcionais. Por exemplo,

$$\partial_f \langle f, g \rangle = \partial_f \int f g dx = g \quad . \quad (4.161)$$

Usa-se a notação  $\mathbb{1}_x, \mathbb{1}_z$  para distinguir os operadores identidade sobre cada espaço de funções. O primeiro é o operador identidade para funções de  $x$ , tais como os campos. O segundo é o operador identidade para funções de  $z = (x, p)$ , tais como  $f$ .

Demonstrar a proposição implica 3 passos. É preciso mostrar que

- os parêntesis  $\{\{\bullet, \bullet\}\}$  são de Poisson
- a trajectória  $(f, A, E)_t$  calculada pela equação de Poisson verifica as equações de Maxwell-Vlasov
- as condições iniciais são suficientes para garantir que as equações de Maxwell sem derivadas temporais sejam satisfeitas  $\forall t$ .

Omite-se o primeiro passo. Encontram-se referências em [11]. Para o segundo passo, é preciso calcular a derivada temporal das 3 componentes do estado,  $\partial_t f$ ,  $\partial_t A$  e  $\partial_t E$ .

Calcula-se a derivada temporal de  $f$ .

$$\partial_f f = \mathbb{1}_z \quad (4.162)$$

$$\partial_f H = \partial_f \langle f, \mathcal{T} \rangle = \mathcal{T} \quad (4.163)$$

$$\partial_t f - \{\{f, H\}\}_f = 0 \quad (4.164)$$

$$\Leftrightarrow \partial_t f - \langle f, \{\mathbb{1}, \mathcal{T}\} \rangle = 0 \quad (4.165)$$

$$\Leftrightarrow \partial_t f + \langle \mathbb{1}, \{f, \mathcal{T}\} \rangle - \langle \mathbb{1}, f \text{Tr}(J \cdot d^2 \mathcal{T}) \rangle = 0 \quad (4.166)$$

$$\Leftrightarrow \partial_t f + \{f, \mathcal{T}\} = 0 \quad (4.167)$$

$$\Leftrightarrow \partial_t f + \partial_p^x \mathcal{T} \cdot \partial_x^p f - \partial_x^p \mathcal{T} \cdot \partial_p^x f = 0 \quad (4.168)$$

$$\Leftrightarrow \partial_t f + v \cdot \partial_x^p f + q(v \cdot \partial_x A^\top) \cdot \partial_p^x f = 0 \quad (4.169)$$

Calcula-se a derivada temporal de  $A$ .

$$\partial_t A = \{\{A, H\}\}_{fEA} = \{\{A, H\}\}_{EA} = -\langle \partial_A A, \partial_E H \rangle \quad (4.170)$$

$$\partial_A A = \mathbb{1}_x \quad (4.171)$$

$$\partial_E H = \frac{1}{2} \partial_E \langle E, E \rangle = E \quad (4.172)$$

$$\partial_t A = -E \quad (4.173)$$

Calcula-se a derivada temporal de  $E$ .

$$\partial_t E = \{E, H\}_{fEA} = \{E, H\}_{EA} = \langle \partial_E E, \partial_A H \rangle \quad (4.174)$$

$$\partial_E E = \mathbb{1}_x \quad (4.175)$$

$$\partial_A H = \langle f, -vq\mathbb{1}_x \rangle + \frac{1}{2} \partial_A \langle \nabla \times A, \nabla \times A \rangle = -\langle f, vq\mathbb{1}_x \rangle + \nabla \times \nabla \times A \quad (4.176)$$

$$\partial_t E = -\langle f, vq\mathbb{1}_x \rangle + \nabla \times \nabla \times A \quad (4.177)$$

a dinâmica do sistema fica

$$q \langle f, v\mathbb{1}_x \rangle + \partial_t E = \nabla \times \nabla \times A \quad (4.178)$$

$$\partial_t A = -E \quad (4.179)$$

$$\partial_t f + v \cdot \partial_x^p f + q(v \cdot \partial_x A^\top) \cdot \partial_p^x f = 0 \quad (4.180)$$

É preciso verificar se este sistema é equivalente ao sistema de Maxwell-Vlasov. Para o fazer, faz-se a conversão  $f \rightarrow f^v$ , motivada por  $p = mv + qA$ . A definição de  $q \langle f, v\mathbb{1}_x \rangle$  permite substituir directamente por  $q \langle f^v, v\mathbb{1}_x \rangle$ .

Para obter  $f^v$  de  $f$ ,

$$f dx \wedge dp = f^v dx \wedge dv \quad (4.181)$$

$$= f^v \frac{1}{m^3} dx \wedge dp \quad (4.182)$$

$$\Leftrightarrow m^3 f(x, mv + qA) = f^v(x, v) \quad , \quad (4.183)$$



em que  $\wedge$  é o produto externo de formas[13].

As derivadas na equação para  $\partial_t f$  são feitas no sistema de coordenadas  $(x, p)$ . Quer-se convertê-las em derivadas no sistema de coordenadas  $(x, v)$ . Usa-se a notação  $\partial_p^x$  para a derivada em ordem a  $p$  a  $x$  constante, e define-se analogamente  $\partial_x^p, \partial_x^v, \partial_v^x$ . Usa-se a definição  $d a(\partial_b^c) = \partial_b^c a$ . Mais uma vez, usa-se  $p = mv + qA$  para fazer a conversão.

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \partial_x^p & \partial_p^x \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \partial_x^v & \partial_v^x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dx & \\ & dv \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x^p & \partial_p^x \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \partial_x^v & \partial_v^x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ -\frac{q}{m} \partial_x^p A & \frac{\mathbb{1}}{m} \end{pmatrix} \\ &\quad \begin{pmatrix} \partial_x^v & \partial_v^x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ -\frac{q}{m} \partial_x^v A & \frac{\mathbb{1}}{m} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

em que  $\mathbb{1}$  é a matriz identidade  $3 \times 3$ .

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} dx & \\ & dv \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} dx & \\ & dv \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x^p & \partial_p^x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dx & \\ & dp \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ -\frac{q}{m} \partial_x^p A & \frac{\mathbb{1}}{m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dx & \\ & dp \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Trocando as derivadas na equação para  $\partial_t f$ ,

$$v \cdot \partial_x^p f + q(v \cdot \partial_x A^\top) \cdot \partial_p^x f \quad (4.184)$$

$$v \cdot \partial_x^v f - \frac{q}{m}(v \cdot \partial_x A) \cdot \partial_v^x f + q(v \cdot \partial_x A^\top) \cdot \partial_p^x f \quad (4.185)$$

$$v \cdot \partial_x^v f - \frac{q}{m}(v \cdot \partial_x A) \cdot \partial_v^x f + \frac{q}{m}(v \cdot \partial_x A^\top) \cdot \partial_v^x f \quad (4.186)$$

$$v \cdot \partial_x^v f - \frac{q}{m}(\nabla \times A \times v) \cdot \partial_v^x f \quad (4.187)$$

Rescrevendo em termos de  $f^v$ , fica

$$\partial_t f + v \cdot \partial_x^v f - \frac{q}{m}(\nabla \times A \times v) \cdot \partial_v^x f = 0 \quad (4.188)$$

$$\partial_t f^v - \frac{q}{m} \partial_t A \cdot \partial_x^v f^v + v \cdot \partial_x^v f^v - \frac{q}{m}(\nabla \times A \times v) \cdot \partial_v^x f^v = 0 \quad (4.189)$$

$$\partial_t f^v + v \cdot \partial_x^v f^v + \frac{q}{m}(-\partial_t A + v \times \nabla \times A) \cdot \partial_v^x f^v = 0 \quad (4.190)$$

Feita a conversão, a dinâmica fica

$$q \langle f^v, v \mathbb{1}_x \rangle + \partial_t E = \nabla \times \nabla \times A \quad (4.191)$$

$$\partial_t A = -E \quad (4.192)$$

$$\partial_t f^v + v \cdot \partial_x^v f^v + \frac{q}{m}(-\partial_t A + v \times \nabla \times A) \cdot \partial_v^x f^v = 0 \quad (4.193)$$

Fazendo a identificação

$$B = \nabla \times A \quad (4.194)$$

$$J = q \langle f^v, v \mathbb{1}_x \rangle \quad (4.195)$$

$$\rho = q \langle f^v, \mathbb{1}_x \rangle \quad (4.196)$$

e aplicando  $\nabla \times$  à equação 4.192, obtêm-se as equações de Maxwell dinâmicas e a equação de Vlasov.

**Nota 4.197.** *Pode parecer estranho que o potencial electrostático  $\phi$  não apareça. Está-se a usar a liberdade na escolha da Gauge para o anular. A esta Gauge chama-se Hamiltoniana[25, 26]. Se a escolha fosse diferente, seria mais complicado obter as equações de Maxwell dinâmicas da aplicação do parêntesis de Poisson.*

As 2 equações de Maxwell não dinâmicas são invariantes para a dinâmica, usando que para  $t = 0$   $Maxwell(f, E, B) = 0$  e a proposição 4.17.

□

## 4.5 Poisson-Vlasov

**Definição 4.198** (Sistema de Poisson-Vlasov). O sistema de Poisson-Vlasov é o sistema físico com estado  $\mu \in \Omega = M(\Gamma)$ ,  $\mu = f\mu^c$ ,

$$\partial_t f + \{f, \mathcal{H}\} = 0 \quad (4.199)$$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} m |v|^2 + q\phi \quad (4.200)$$

$$\phi[\mu] = q \int_{\Gamma} \mu V_{12} \quad (4.201)$$

$$V_{12} = V(|x_1 - x_2|), V(r) = \frac{q}{4\pi} \frac{1}{r} \quad (4.202)$$

**Nota 4.203.** *Aparentemente, trata-se de um sistema estatístico Hamiltoniano. No entanto, não existe nenhum sistema não estatístico associado: o potencial é não local, não sendo uma função exclusiva do espaço  $\Gamma$ .*

O sistema de Poisson-Vlasov é um caso particular tanto do sistema Maxwell-Vlasov como da equação para a evolução da função marginal de um plasma Hamiltoniano. No primeiro caso, assume-se que  $B = 0$  e projecta-se  $(f, E, B)$  na componente  $f$ . No segundo, faz-se  $Z = Z_c$ , ou seja, assume-se que o plasma é composto apenas por espécies carregadas.

**Proposição 4.204.** *O sistema de Poisson*

$$\partial_t f = \{\{f, H\}\} \quad (4.205)$$

$$\{\{F, G\}\}(f) = \int_{\Gamma} f \{\partial_f F, \partial_f G\} \quad (4.206)$$

$$H(f) = \int_{\Gamma} f \frac{1}{2} m v^2 + \int_{\Gamma} f \frac{1}{2} q \phi[f] = \left\langle f, \frac{1}{2} m v^2 \right\rangle + \left\langle f, \frac{1}{2} q \phi[f] \right\rangle \quad (4.207)$$

é uma representação completa do sistema de Poisson-Vlasov.

*Demonstração.* O parêntesis é de Poisson, seguindo os argumentos dados em [14]. Para mostrar que a equação de Vlasov é obtida deste parêntesis, segue-se o mesmo argumento que se usa para provar 2.107.

$$\partial_f H = \frac{1}{2} m |v|^2 + \frac{1}{2} q \phi[f] + \frac{1}{2} q \overbrace{\left\langle f, \partial_f \phi[f] \right\rangle}^{\phi[f]} = \mathcal{H} \quad (4.208)$$

$$\partial_f f = \mathbb{1} \quad (4.209)$$

$$\partial_t f = \partial_t f = \int_{\Omega} f \{\mathbb{1}, \mathcal{H}\} = -\{f, \mathcal{H}\} - A \quad (4.210)$$

Usando a notação para a divergência  $d \cdot$ , o termo  $A$  escreve-se

$$A = d \cdot (J \cdot d \mathcal{H}) = \text{Tr}(J \cdot d^2 \mathcal{H}) = -\text{Tr}(d^2 \mathcal{H} \cdot J) = -\text{Tr}(J \cdot d^2 \mathcal{H}) = 0 \quad (4.211)$$

□

## 4.6 Boltzmann

### 4.6.1 Introdução

A equação de Boltzmann para colisões de esferas rígidas é

$$\partial_t f_t^1(x, p) + v \cdot \partial_x f_t^1(x, p) = \lambda \int_{p_2} \int_{\hat{S}^+} \left( f_t^1(x, p^*) f_t^1(x, p_2^*) - f_t^1(x, p) f_t^1(x, p_2) \right) \Delta v \cdot n = Q(f) \quad (4.212)$$

com

- $f^1$  é a função de distribuição normalizada a 1;
- $\Delta v = v - v_2$ ;
- $\hat{S}^+ = \hat{S}^+(\Delta p) = \{n : n \cdot \Delta p > 0\}$ ;
- $p^* = p - nn \cdot \Delta p$ ;
- $p_2^* = p_2 + nn \cdot \Delta p$ ,

Quer-se obtê-la como um caso limite da evolução da função de distribuição associada a um plasma Hamiltoniano definido em 4.95.

### 4.6.2 Colisões elásticas

Uma colisão binária de 2 esferas rígidas de raio  $r$  e massa  $m$  é completamente determinada pelas hipóteses

1. As partículas não se sobrepõem(ou seja,  $|x_1 - x_2| > 2r$ );
2. Conservação da energia ;
3. Conservação do momento linear;
4. Conservação do momento angular;
5. Variação dos momentos paralela à direcção normal às superfícies durante o choque.

A figura 4.6.2 usa-as para obter a relação entre os momentos pré e pós colisão. Como as partículas não se sobrepõem, a energia total do estado final e do estado inicial é apenas a energia cinética. A conservação do momento angular justifica que os 4 momentos estão sobre o mesmo plano, pelo que se pode reduzir o problema  $3D$  ao problema  $2D$ . Começa-se por traçar o momento total inicial, somando graficamente  $p_1, p_2$ . Os momentos  $p_1, p_2$  são as linhas a azul, sendo que o primeiro vector é  $p_1$ , que parte da origem. Traçado o momento total inicial, desenha-se uma circunferência centrada em  $\frac{p_1+p_2}{2}$ , que atravesse o ponto  $p_1$ . A circunferência representa a conservação da energia. Partindo de  $p_1$ , desenha-se uma linha na direcção de  $n$ , estendida até intersectar a circunferência. A linha que une a origem ao ponto obtido é o momento final da partícula 1,  $p_1^*$ . A linha que une  $p_1^*$  ao momento total é o momento final da partícula 2,  $p_2^*$ . Se se desenhar o momento relativo  $p_1 - p_2$ , verifica-se a colisão roda o momento relativo. (só é verdade porque as massas são iguais). Vê-se ainda que a variação de cada um dos momentos é dada pela projecção do momento relativo na direcção normal.

Assim,

**Definição 4.213** (mapa colisional  $h$ ).

$$h(n, p_1, p_2) = (p_1^*, p_2^*) \quad (4.214)$$

$$p_1^* = p_1 - nn \cdot \Delta p \quad , \quad p_2^* = p_2 + nn \cdot \Delta p \quad , \quad (4.215)$$

onde se usa

$$\Delta a = a_1 - a_2 \quad (4.216)$$

$$n = \Delta x / 2r \quad . \quad (4.217)$$

Quer-se usar um potencial contínuo para modelar uma interacção deste tipo.

Uma trajectória contínua colisional é uma sequência de intervalos de movimento livre e de movimentos em interacção. No movimento livre a trajectória é trivial, já que o momento é constante e a projecção nas posições é um movimento rectilíneo uniforme. Quanto mais colisional for a trajectória, menor é a percentagem de tempo passado em cada interacção.

No limite em que este tempo vai para 0, a trajectória é uma linha poligonal isomorfa a uma sequência de pares  $(t, P)^i$ , em que  $t^i$  é o tempo em que se dá a  $i$ -ésima colisão e  $P^i$  são os momentos das partículas pós colisões. Aplicando a conservação de energia e momento, e dado o estado inicial, restringe-se os

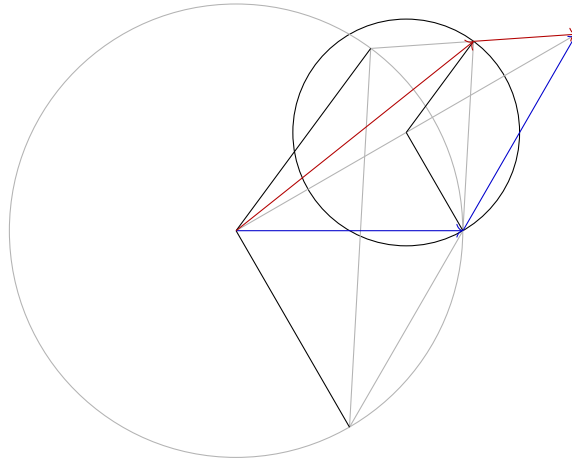


Figura 4.1: Ilustração da conservação de energia e de momento numa colisão elástica. As linhas a azul são os momentos iniciais, as linhas a encarnado os momentos finais. O círculo a preto representa a conservação da energia cinética. O círculo maior ilustra que quando  $m_1 = m_2$ , o efeito da colisão é uma rotação do momento relativo.

momentos possíveis na sequência  $P^i$ . A determinação exacta do salto depende da natureza da interacção. Por agora, limita-se a discussão a colisões binárias, ou seja, trajectórias no espaço de fases em que apenas 2 das  $N$  partículas estão em aceleração simultânea.

**Proposição 4.218.** *Considere-se um gás com  $S = 1$  e  $N_1 = 2$ . Usando um potencial da forma*

$$V(r) = \begin{cases} \gamma & r < r_{in} \\ g(r) & r_{in} < r < r_{out} \\ 0 & r > r_{out} \end{cases} \quad (4.219)$$

e tomando o limite

$$\gamma \rightarrow \infty \quad (4.220)$$

$$r_{in}, r_{out} \rightarrow r \quad , \quad (4.221)$$

obtém-se uma interacção equivalente a uma colisão (elástica) de esferas rígidas de raio  $r$ .

*Demonstração.* O Hamiltoniano é conservado e coincide com a energia total. O momento total é conservado porque a energia só depende da distância entre partículas. O momento angular é conservado porque o potencial é central. Mostra-se agora que a variação dos momentos é paralela à direcção  $n$ , direcção que une os centros das 2 esferas no instante de colisão.

A zona de interacção colapsa na superfície  $S = \{z : |x_1 - x_2| = 2r\}$ . A trajectória projectada nas posições  $x_1, x_2$  é um movimento livre, um toque instantâneo na superfície  $S$ , e de novo movimento livre. Assim, a projecção em  $X$  da zona  $V$  em que a colisão ocorre, tende para um ponto  $X_0 : (x_1, x_2 = x_1 + 2rn)$  (é o ponto em que a trajectória toca em  $S$ ). Como a direcção de variação de momento só depende das posições,

$$\frac{1}{V} \int_{\text{colisão}} \partial_X \mathcal{H} \rightarrow \partial_X \mathcal{H}|_{X_0} \quad (4.222)$$

ou seja, o valor médio durante uma colisão das direcções de variação dos momentos é igual ao valor sobre  $X_0$ .

$\mathcal{H}$  só depende das distâncias entre partículas. Logo,  $\partial_X \mathcal{H}$  é paralelo a  $\partial_X |x_1 - x_2|$ :

$$\partial_{x_1} |x_1 - x_2| = (x_1 - x_2)/2r = n \quad (4.223)$$

$$\partial_{x_2} |x_1 - x_2| = (x_2 - x_1)/2r = -n \quad . \quad (4.224)$$

Falta verificar que as partículas não se interpenetram. Para isso, é necessário a segunda parte do limite,  $\gamma \rightarrow \infty$ . Admite-se que o estado inicial tem energia cinética finita, inferior a  $\gamma$ . Caso as partículas se penetrassem, a energia final total seria pelo menos  $\gamma$ , o que contradiz a hipótese inicial. Logo, qualquer colisão com energia cinética pré-colisão finita não pode resultar num estado com  $|x_1 - x_2| < 2r$ .  $\square$

**Nota 4.225.** No caso geral, com  $N > 2$ , podem existir colisões não binárias. Do ponto de vista das esferas rígidas, estão mal definidas. Ou melhor, não é possível definir unicamente o estado final de uma colisão de 3 esferas rígidas, sem usar hipóteses adicionais sobre a natureza da interação. Ver-se-á mais à frente que o impacto de colisões não binárias nos resultados pretendidos é tendencialmente 0.

Divide-se  $S$  nos estados pré ( $S^-$ ) e pós colisão ( $S^+$ ).

**Proposição 4.226.** O mapa  $\phi_{0+}$  é descontínuo sobre a superfície  $S$ . Sobre  $S^+$  é a identidade. Sobre a superfície  $S^-$ , a componente dos momentos é dada pelo mapa colisional  $h$  e a componente das posições é a identidade.

*Demonstração.* É um resultado directo da proposição 4.218.  $\square$

**Proposição 4.227.**  $\phi$  é conservativo. Ou seja,  $|\partial_Z \phi| = 1$ , onde  $\partial_Z \phi$  é a matriz jacobiana e  $|\bullet|$  é o determinante.

*Demonstração.* Podia-se evocar que  $\phi$  é o limite de uma dinâmica Hamiltoniana para concluir que é conservativo. Opta-se por provar explicitamente. O mapa  $\phi$  restrito a uma dada região é dado por

$$\phi_t = \phi_{\Delta t_1} \circ \phi_{0+} \circ \dots \circ \phi_{0+} \circ \phi_{\Delta t_N} \quad , \quad (4.228)$$

em que a sequência  $\Delta t_i$  é a lista de tempos entre colisões que ocorrem na região escolhida,

no intervalo  $t$ .  $\phi_{\Delta t_i}$  é a dinâmica de um par de partículas livres, pelo que é conservativo. A composição de mapas conservativos é conservativa. Logo, basta provar que  $\phi_{0+}$  é conservativo. Usa-se  $x = (x_1, x_2)$ , em que  $x_1, x_2$  são as posições das duas partículas. Faz-se o mesmo para os momentos.

$$\partial_x x^* = \mathbb{1}, \partial_p x^* = 0 \quad (4.229)$$

$$\partial_{p_1} p_1^* = \mathbb{1} - nn \cdot \quad , \quad \partial_{p_2} p_1^* = nn \cdot \quad (4.230)$$

$$\partial_{p_1} p_2^* = nn \cdot \quad , \quad \partial_{p_2} p_2^* = \mathbb{1} - nn \cdot \quad (4.231)$$

A matriz jacobiana é da forma

$$\begin{pmatrix} \partial_x x^* & \partial_x p^* \\ 0 & \partial_p p^* \end{pmatrix} \quad . \quad (4.232)$$

Usando que o determinante de uma matriz desta forma é dado pelo produto dos determinantes dos blocos diagonais, fica

$$|\partial_Z f| = |\partial_x x^* \partial_p p^*| = |\partial_p p^*| \quad . \quad (4.233)$$

A matriz  $\partial_p p^*$  é composta por 4 blocos  $3 \times 3$ , sendo que a 2ª linha de blocos comuta. Nesse caso, o determinante é dado por

$$|\partial_p p^*| = |\partial_{p_1} p_1^* \cdot \partial_{p_2} p_2^* - \partial_{p_2} p_1^* \cdot \partial_{p_1} p_2^*| = |\mathbb{1}| = 1 \quad . \quad (4.234)$$

$\square$

### 4.6.3 Derivação da equação de Boltzmann para esferas rígidas

**Definição 4.235.**

$$R_{ij} = \{z \in : r_{in} < |x_i - x_j| < 2r_{out}\} \quad (4.236)$$

$$R_I = \bigcup R_{ij}, R_L = \Omega \setminus R_I \quad (4.237)$$

$$S_{ij}^i = \{Z : |x_i - x_j| = 2r_{in}\} \quad (4.238)$$

$$S_{ij}^o = \{Z : |x_i - x_j| = 2r_{out}\} \quad (4.239)$$

$$R_{in} = \{Z : |x_i - x_j| < 2r_{in}\}, R_{out} = \{Z : |x_i - x_j| > 2r_{out}\} \quad (4.240)$$

Chama-se a

$R_{ij}$  **zona de interacção** ( $ij$ );

- $R_I$  zona de Interação;
- $R^L$  zona de movimento Livre;
- $S_{ij}^i$  superfície interior (i=in) da interacção (ij) ;
- $S_{ij}^o$  superfície exterior (o=out) da interacção (ij) ;
- $R_{in}$  é a zona interna;
- $R_{out}$  é a zona externa.

**Definição 4.241.**  $\xi$  é o campo vectorial Hamiltoniano gerado por  $\mathcal{H}$ .

$$\xi(Z) = X_{\mathcal{H}}(Z) = \xi_L(P) + \xi_I(X) \quad (4.242)$$

$$\xi_I \sum_{ij} \xi_{ij}(|x_i - x_j|) := - \sum_{ij} \partial_x V(|x_i - x_j|) \quad (4.243)$$

$$\xi_L = P/m \quad . \quad (4.244)$$

$\xi_L$  é a componente do campo vectorial Hamiltoniano que diz respeito ao movimento livre.  $\xi_I$  é a componente do campo vectorial Hamiltoniano que diz respeito ao movimento em interacção .

**Nota 4.245.** As regiões  $R_{ij}$  são o suporte de  $\xi_{ij}$ .

Como se viu, no limite das esferas rígidas a interacção não é contínua. A descontinuidade implica que a equação de continuidade deve ser usada com cuidado. Acompanhando um volume cuja evolução interseque a região de interacção, o movimento resulta num "teleporte" de uma fatia para a região dos momentos pós colisionais. Este salto impede a derivação da equação de continuidade . Deve-se portanto usar directamente a conservação de probabilidade de um volume macroscópico no espaço de fases, fazer o limite das esferas rígidas, e depois tornar o volume tão pequeno quanto se queira.

Integra-se a equação de continuidade numa região  $R = R_1 \times \Gamma_2 \dots \times \Gamma_N$ , com  $R_1$  um cubo no espaço de fases da partícula 1. Ou seja, as suas paredes são do tipo  $z_1^i = cte$ ,  $1 \leq i \leq 6$ . A forma de  $R_1$  garante que a fronteira de  $R$  é dada por  $\partial R_{x_1} \cup \partial R_{p_1}$ , em que  $\partial R_{p_1}$  é a união das superfícies com  $p_i = cste$  e  $\partial R_{x_1}$  é a união das superfícies com  $x_i = cste$ .

$$\int_R \partial_t f^N + \partial_X \cdot (f^N \xi) + \partial_P \cdot (f^N \xi) = 0 \quad . \quad (4.246)$$

O domínio de integração é completo nas coordenadas de todas as partículas excepto na partícula 1. Utilizando o teorema de Gauss e as condições fronteira para  $f^N$ , só sobrevivem as divergências nas coordenadas da partícula 1,

$$\begin{aligned} \int_R \partial_t f^N + \partial_{x_1} \cdot (f^N \xi) &= - \int_R \partial_{p_1} \cdot (f^N \xi) \\ \int_R \partial_t f^N + v_1 \cdot \partial_{x_1} (f^N) &= - \int_R \partial_{p_1} \cdot (f^N \xi) \quad . \end{aligned} \quad (4.247)$$

Usando o teorema de Gauss do lado direito,

$$\int_R \partial_t f^N + v_1 \cdot \partial_{x_1} (f^N) = - \int_{\partial R_{p_1}} f^N \xi \cdot n \quad . \quad (4.248)$$

A normal exterior de  $\partial R_{p_1}$  selecciona apenas a parte de  $\xi$  com projecção na direcção de variação do momento  $p_1$ . Observando que  $\xi \cdot n = \xi_I \cdot n$  sobre  $\partial R_{p_1}$ , conclui-se que este fluxo é a variação de probabilidade do volume  $R$  provocada pelas interacções. Define-se a superfície  $w = R_I \cap \partial R_{p_1}$ . Nesse caso,

$$\int_R \partial_t f^N + v_1 \cdot \partial_{x_1} (f^N) = - \int_w f^N \xi \cdot n \quad . \quad (4.249)$$

No limite das esferas rígidas,  $\xi$  diverge sobre  $R_I$  e consequentemente sobre  $w$ . No entanto,  $w$  tende para uma região de medida 0, pelo que o fluxo fica indeterminado. Para calcular o termo colisional, usa-se o teorema de Gauss para converter o fluxo num outro integral de superfície, em que  $\xi \cdot n$  já não diverge. Considere-se a fronteira de  $R_I$ .

**Proposição 4.250.**

$$\partial R_I = S^o \cup S^i \setminus R_I. \quad (4.251)$$

**Definição 4.252** (Superfícies  $S^o, S^i$ ).

$$S^o = \bigcup_{ij} S_{ij}^o \quad (4.253)$$

$$S^i = \bigcup_{ij} S_{ij}^i \quad (4.254)$$

*Demonstração.* Para qualquer  $\varepsilon \in \mathbb{R}$  e para qualquer ponto  $Z \in S^o \cup S^i \setminus R_I$  existe um ponto  $Z' \in R_I$  tal que  $|Z - Z'| < \varepsilon$ . Admite-se que  $Z \in S^o$ . Nesse caso, existe  $S_{ij}^o \ni Z$ . Constroi-se  $Z'$  diminuindo a distância  $|x_i - x_j|$ . Faz-se o mesmo caso  $Z \in S^i$ .

Também existe sempre um ponto  $Z'' \in R_I$  com  $|Z - Z''| < \varepsilon$ . Para o provar, assume-se que não existe  $Z''$ . Então  $Z$  pertence ao interior de  $R_I$ . Como  $R_I$  é aberto,  $Z \in R_I$ , contradizendo a hipótese inicial de que  $Z \notin R_I$ . Logo, existe  $Z''$ . Ou seja, qualquer vizinhança de um ponto de  $S^o \cup S^i \setminus R_I$  inclui pontos de  $R_I$  e de  $R_L = \Omega \setminus R_I$ . Ou seja,  $\partial R_I = S^o \cup S^i \setminus R_I$  □

Existem duas formas de atravessar a fronteira de  $R_I$ . Em colisão interna, quando existe um par  $(ij)$  tal que  $|x_i - x_j| = 2r_{in}$ , ou em colisão externa, quando existe um par  $(ij)$  tal que com  $|x_i - x_j| = 2r_{out}$ . Os pontos do primeiro tipo são recolhidos em  $\tilde{S}^i$ . Pertencem por definição a  $S^i$ . Os do segundo tipo são recolhidos em  $\tilde{S}^o$ . Pertencem por definição a  $S^o$ .

$$\tilde{S}^o = \partial R_I \cap S^o \quad (4.255)$$

$$\tilde{S}^i = \partial R_I \cap S^i \quad (4.256)$$

Estas superfícies não são disjuntas: pode haver um estado  $Z$  com um par de partículas em colisão externa ao mesmo tempo que outro par está em colisão interna.

**Proposição 4.257.** Diz-se que duas regiões  $A, B$  são semelhantes,  $A \sim B$ , se  $A \setminus B$  tem medida 0 em  $A$  ou em  $B$ . No limite  $r_{in}, r_{out} \rightarrow r$ ,

$$S^o \sim \tilde{S}^o \quad (4.258)$$

$$S^i \sim \tilde{S}^i \quad (4.259)$$

*Demonstração.* Viu-se que  $\partial R_I = S^o \cup S^i \setminus R_I$ .  $R_{ij} \rightarrow \{Z : r < |x_i - x_j| < r\} = \emptyset$ . Logo,  $R_I \rightarrow \emptyset$ . Usando a proposição 4.257,  $\partial R_I \rightarrow S^o \cup S^i$ . Usando as equações 4.255, obtém-se o resultado. □

Considere-se  $V = T[w] \cap R \cap R_I$ . Este volume tem como fronteira a superfície  $w$ , parte da fronteira tangente a  $\xi$  de  $T[w]$  e ainda 2 superfícies  $\tilde{s}^o, \tilde{s}^i$ . São dadas por

**Definição 4.260** (Superfícies  $\tilde{s}^o, \tilde{s}^i$ ).

$$\tilde{s}^o = \tilde{S}^o \cap V \quad (4.261)$$

$$\tilde{s}^i = \tilde{S}^i \cap V \quad (4.262)$$

Para que uma trajectória pertença a  $V$ , é necessariamente colisional. Para que a trajectória intersecte a fronteira de  $V$ , ou atravessa a fronteira de  $R$  ou atravessa a fronteira de  $R_I$ , já que a fronteira de  $T[w]$  é

tangente às trajectórias. Uma trajectória colisional que atravesse a fronteira de  $R$  atravessa por definição  $w$ . Atravessar a fronteira de  $R_I$  implica atravessar  $s^o$  ou  $s^i$ .

Aplicando o teorema de Gauss a  $V$ ,

$$\int_V \partial_Z \cdot (f^N \xi) = \int_w f^N \xi \cdot n + \int_{s^o} f^N \xi \cdot n + \int_{s^i} f^N \xi \cdot n \quad . \quad (4.263)$$

O integral sobre  $w$  é o que se quer estimar.

**Hipótese 4.264.** No limite das esferas rígidas,  $f^N$  é uma função suave na zona livre, tanto em  $Z$  como em  $t$ .

**Proposição 4.265.** No limite das esferas rígidas, a hipótese 4.264 só é verificada caso

$$\xi \cdot \partial_Z f^N|_{R_I} < \infty \quad . \quad (4.266)$$

Em particular,

$$(f_0^N - f_0^N \circ \phi_{0^+})|_{S^{i,o}} = 0 \quad . \quad (4.267)$$

*Demonstração.* Da equação de continuidade, tem-se que  $\partial_t f^N = -\xi \cdot \partial_Z f^N$ . Fixe-se as condições iniciais  $\mu_0 = f_0^N \mu^c$ . A velocidade  $\xi$  diverge, porque o termo  $\xi_L$  diverge. Recordando a derivação da equação de Liouville 2.102, relembra-se o passo

$$f_t^N \circ \phi = f_0^N \quad . \quad (4.268)$$

Esta equação deve ser satisfeita, independentemente de  $\phi$  ser descontínuo no limite. Ou seja,  $f^N$  não varia materialmente. A conservação material de  $f$  implica a conservação material de  $\partial_t f^N$ . Como as trajectórias que passam em  $R_I$  atravessam  $R_L$  e como  $\partial_t f^N$  é uma constante do movimento, a não convergência de  $\partial_t f^N$  sobre  $R_I$  implica a não convergência de  $\partial_t f^N$  sobre  $R_L$ . Para impedir que isto aconteça, é então necessário exigir que

$$\xi \cdot \partial_Z f^N|_{R_I} < \infty \quad . \quad (4.269)$$

Em particular,

$$\hat{\xi} \cdot \partial_Z f_0^N|_{R_I} \rightarrow 0, \quad (4.270)$$

em que  $\hat{\xi}$  é a normalização de  $\xi$ . Significa que a função  $f_0^N$  não deve variar na direcção tangente às trajectórias, dentro de  $R_I$ . Ou seja, o valor de  $f_0^N$  deve ser constante sobre a porção colisional das trajectórias. Como  $Z \in S$  e  $\phi_{0^+}(Z)$  pertencem à mesma trajectória e pertencem à zona de interacção, obtém-se o resultado 4.267.  $\square$

Como  $\phi_{0^+}$  não é contínuo, a função  $f_0^N$  também não pode ser já que

$$f^N|_{s^o} = f^N \circ \phi_{0^+}|_{s^o} \neq f^N \circ \phi_{0^+}|_{s^i} = f^N|_{s^i} \quad . \quad (4.271)$$

**Definição 4.272** (Superfícies  $S, s, S_{ij}, s_{ij}$ ).

$$S_{ij} = \{Z : |x_i - x_j| = 2r\} \quad , \quad s_{ij} = S_{ij} \cap R \quad (4.273)$$

$$S = \bigcup_{ij} S_{ij} \quad , \quad s = S \cap R \quad (4.274)$$

Assim, apesar de  $S^o, S^i \rightarrow S$ , a descontinuidade das funções  $f^N, \phi$  sobre  $S$  leva a que os integrais sobre  $S^o$  e  $S^i$  não tendam para o mesmo valor.

Voltando à equação 4.263, a divergência no integral de volume é dada por  $\partial_Z f^N \cdot \xi$  porque  $\xi$  é um campo vectorial Hamiltoniano. No limite das esferas rígidas, viu-se que  $R_I$  é uma região de medida zero em  $\Omega$ . A integranda é finita, pela proposição 4.265. Logo, o integral de volume fica 0.

$$\int_w f^N \xi \cdot n = - \int_{s^o} f^N \xi \cdot n - \int_{s^i} f^N \xi \cdot n \quad . \quad (4.275)$$



Note-se que o lado esquerdo da equação já não diverge:  $\xi \cdot n$  é finito sobre as superfícies  $\bar{s}$ , porque  $n$  só tem componentes  $X$ . Ou seja,  $\xi \cdot n$  é dado por uma combinação linear das velocidades  $v$  das partículas. Usando a proposição 4.257, cada uma das superfícies  $\bar{s}$  pode ser substituída por  $s$ .

$$\int_w f^N \xi \cdot n = - \int_{s^o} f^N \xi \cdot n - \int_{s^i} f^N \xi \cdot n \quad . \quad (4.276)$$

Faz-se agora o segundo limite,  $\gamma \rightarrow \infty$ . Classificam-se as interações de acordo com a zona  $R_{in}, R_{out}$  de onde partem e onde acabam. Usa-se  $o$  para a zona *out* e  $i$  para a zona *in*. Obtêm-se 4 classes :  $\{o \rightarrow o, o \rightarrow i, i \rightarrow o, i \rightarrow i\}$ , em que o primeiro índice é a zona de partida.

**Proposição 4.277.** *Seja  $R_{in} = \cup \{z : |x_i - x_j| < 2r\}$ . O fluxo provocado por transições  $i \rightarrow o, o \rightarrow i$  é 0.*

*Como consequência,*

$$f_0^N|_{R_{in}} = 0. \quad (4.278)$$

*Ou seja, os únicos ensembles iniciais válidos devem começar vazios na região interdita  $R_{in}$ .*

**Nota 4.279.** *Esta condição aparece em [1], sem a mesma motivação.*

*Demonstração.* Atravessar a interface *in/out* implica receber ou dar  $\gamma$  de energia. Em qualquer dos casos, ou o estado inicial ou o estado final têm pelo menos  $\gamma$  de energia cinética. Quando se faz o limite  $\gamma \rightarrow \infty$ , isto implica que pelo menos um dos momentos se desloque para infinito. Viu-se que  $f^N$  deve ser constante ao longo dos saltos nos momentos provocados pelas colisões. As condições fronteira sobre  $f^N$  anulam  $f^N$  para momentos infinitos. Logo, o valor de  $f^N$  ao longo de colisões  $i \rightarrow o, o \rightarrow i$  é 0, o que implica que não há fluxo.

Uma colisão que parta da região interna implica necessariamente uma variação positiva da energia cinética, já que o potencial de interação é monótono. Ou seja, todas as colisões internas são do tipo  $i \rightarrow o$ . Usando a conservação de probabilidade para propagar o valor de  $f^N$  na região interna, obtêm-se 4.278. □

Conclui-se que, no limite, o integral sobre  $s^i$  deve ser 0. Pode-se eliminar o índice fazendo  $s^o = s$ , se se tiver o cuidado de lembrar que a integranda deve ser avaliada na zona exterior.

$$\int_w f^N \xi \cdot n = - \int_s f^N \xi \cdot n \quad . \quad (4.280)$$

Relembra-se que  $s = \cup_{ij} s_{ij}$ . Estas superfícies não são disjuntas, mas a união das suas intersecções forma uma região de dimensão  $6N - 2$ , dada por

$$s_2 = \bigcup_{ij \neq km} s_{ij} \cap s_{km} \quad (4.281)$$

Como a integranda é finita, a contribuição da região  $s_2$  é 0. Logo,

$$\int_w f^N \xi \cdot n = - \sum_{ij} \int_{s_{ij}} f^N \xi \cdot n_j \quad . \quad (4.282)$$

É neste passo que se conclui que as interações não binárias não contribuem para a equação de Boltzman: o termo de colisões depende linearmente do fluxo através de cada superfície,  $s_{ij}$ . A região correspondente a colisões não binárias está incluída em  $s_2$ , que se viu não contribuir para o integral. A superfície  $s_{ij}$  transforma-se na superfície  $s_{23}$  aplicando a permutação  $P_{2i} \circ P_{3j}$ :

$$P_{2i} \circ P_{3j}(S_{ij}) = \{P_{2i} \circ P_{3j}(Z) : |x_i - x_j| = 2r\} = \{Z : |x_2 - x_3| = 2r\} = S_{23} \quad (4.283)$$

$$P_{2i} \circ P_{3j}(R) = R \quad (4.284)$$

$$P_{2i} \circ P_{3j}(s_{ij}) = P_{2i} \circ P_{3j}(R \cap S_{ij}) = R \cap S_{23} = s_{23} \quad (4.285)$$

Da mesma forma, a superfície  $s_{1j}$  transforma-se na superfície  $s_{12}$  aplicando  $P_{2j}$ . Note-se que não se consegue transformar  $s_{1j}$  em  $s_{ij}, i \neq j$  porque a região  $R$  não é simétrica para permutações que envolvam a partícula 1.

Juntando tudo fica

$$\int_{s_{1j}} f^N \xi \cdot n = \int_{P_{2j}(s_{12})} f^N \xi \cdot n = \int_{s_{12}} f^N \circ P_{2j} (\partial_Z P_{2j} \cdot \xi \circ P_{2j}) \cdot n_j \quad , \quad (4.286)$$

onde se usou que uma permutação é uma transformação unitária. O Hamiltoniano que gera  $\xi$  é simétrico para trocas de partículas.

$$\mathcal{H} \circ P_{ij} = \mathcal{H} \quad . \quad (4.287)$$

Aplicando o gradiente,

$$\partial_Z P_{ij} \cdot (\partial_Z \mathcal{H} \circ P_{ij}) = \partial_Z \mathcal{H} \quad , \quad (4.288)$$

em que  $\partial_Z P_{ij}$  é a matriz jacobiana de  $P_{ij}$ . Relembrando que  $\xi = X_{\mathcal{H}} = \Lambda \cdot \mathcal{H}$ ,

$$\partial_Z P_{ij} \cdot (\xi \circ P_{ij}) = \xi \quad . \quad (4.289)$$

Substituindo,

$$\int_{s_{1j}} f^N \xi \cdot n = \int_{s_{12}} f^N \circ P_{2j} \xi \cdot n \quad (4.290)$$

Admite-se a validade da hipótese 4.115, ou seja,

$$f^N = f^N \circ P_{ij} \quad . \quad (4.291)$$

Esta hipótese permite escrever

$$\int_{s_{1j}} f^N \xi \cdot n = \int_{s_{12}} f^N \xi \cdot n \quad . \quad (4.292)$$

No caso de uma superfície  $s_{ij}, ij \neq 1$ , aplica-se o argumento análogo para transformar o integral sobre  $s_{ij}$  no integral sobre  $s_{23}$ .

$$\int_{s_{1j}} f^N \xi \cdot n = \int_{P_{2j}(s_{12})} f^N \xi \cdot n = \int_{(s_{12})} f^N \circ P_{2j} (\partial_Z P_{2j} \cdot \xi) \circ P_{2j} \cdot n \quad (4.293)$$

A normal nos integrais em  $s_{ij}$  aponta para o exterior de  $R_{ij}$ , ou seja, na direcção do gradiente de  $|x_i - x_j|$ . As superfícies são curvas de nível de  $|x_i - x_j|$ , pelo que a direcção da normal é dada por  $\partial_Z |x_i - x_j|$ . As únicas componentes da normal são

$$n_i = \partial_{p_i} |x_i - x_j| + \partial_{x_i} |x_i - x_j| = 0 + (x_i - x_j)/r \quad (4.294)$$

$$n_j = \partial_{x_j} |x_i - x_j| = (x_j - x_i)/r = -n_i \quad (4.295)$$

$$(4.296)$$

Logo,

$$\int_{s_{ij}} \xi \cdot n = \int_{s_{ij}} (v_i - v_j) \cdot n_i = \int_{s_{ij}} \Delta v \cdot n_i \quad (4.297)$$

Substituindo na equação 4.293,

$$\int_w f^N \xi \cdot n = -(N-1) \int_{s_{12}} f^N \Delta_{12} v \cdot n_1 - (N-1)(N-2) \int_{s_{23}} f^N \Delta_{23} v \cdot n_2 \quad . \quad (4.298)$$

Quer-se mostrar que o integral sobre  $s_{23}$  é 0. Considere-se o mapa  $T$

$$T : Z \rightarrow Z^* \quad (4.299)$$

$$z_i^* = z_i \quad i \neq 2, 3 \quad (4.300)$$

$$(z_2, z_3) \rightarrow (z_2, z_3)^* \quad (4.301)$$

$$(x_2, x_3)^* = (x_2, x_3) \quad , \quad (p_2, p_3)^* = h(n, p_2, p_3) \quad . \quad (4.302)$$

Este mapa limita-se a transformar um estado pré-colisão (23) num estado pós-colisão (23) e vice-versa. Aplicando-o a  $s_{23}$ , que é o conjunto de todos os estados em colisão (23), obtém-se de novo  $s_{23}$ .

Assim,

$$\int_{s_{23}} f^N \Delta v \cdot n = \int_{T(s_{23})} f^N \Delta v \cdot n_2 = - \int_{s_{23}} f^N \circ T \Delta v \cdot n_2 \quad , \quad (4.303)$$

em que o sinal aparece porque a transformação de  $\Delta v \cdot n_2$  motivada por  $T$  é  $-\Delta v \cdot n_2$ . Relembrando que  $f^N \circ \phi_{0^+} = f^N$ ,  $F^N \circ T = f^N$ , pelo que

$$\int_{s_{23}} f^N \Delta v \cdot n_2 = - \int_{s_{23}} f^N \Delta v \cdot n_2 = 0 \quad . \quad (4.304)$$

Só  $s_{12}$  contribui na equação 4.293,

$$\int_w f^N \xi \cdot n = -(N-1) \int_{s_{12}} f^N \Delta v \cdot n_1 \quad . \quad (4.305)$$

Assim, usando a equação acima e substituindo em 4.249,

$$\int_R \partial_t f^N + v_1 \cdot \partial_{x_1} f^N = (N-1) \int_{s_{12}} f^N \Delta v \cdot n_1 \quad (4.306)$$

#### 4.6.4 Boltzmann e BBGKY

Usando que as interacções não binárias não contribuem, pode-se obter a equação 4.306 partindo de 4.121.

Começa-se por integrar na região  $R_1$  a equação obtida em 4.121,

$$\frac{1}{N-1} \int_R \partial_t f^N + v_1 \cdot \partial_{x_1} (f^N) = - \int_{\partial R_{p_1}} f^N \xi_{12} \cdot n \quad (4.307)$$

, onde se observou que  $\{f^N, V_{12}\}_1$  é a divergência nos momento da partícula 1 de  $f^N \xi_{12}$ . O termo do lado direito é o o fluxo de  $\xi$  sobre a superfície  $w_{[12]} = \{z \in \partial R_{p_1} : \xi \cdot n = \xi_{12} \cdot n \neq 0\}$ .

$$\frac{1}{N-1} \int_R \partial_t f^N + v_1 \cdot \partial_x (f^N) = - \int_{w_{[12]}} f^N \xi \cdot n \quad (4.308)$$

Nem todas as colisões (12) que saem de  $R$  estão incluídas em  $w_{[12]}$ . Nomeadamente, uma trajectória em colisão (12), (13) (colisão em que 1 interage com 2 e 2 interage com 3) não atravessa, por definição,  $w_{[12]}$ . No entanto, sabe-se que as colisões não binárias não vão contribuir para o resultado final, no limite das esferas rígidas. Assim, pode-se substituir o integral em  $w_{[12]}$  pelo integral em  $w_{12} = R_{12} \cap \partial R_{p_1}$ , que inclui todos os pontos de  $\partial R_{p_1}$  em colisão (12).

$$\frac{1}{N-1} \int_R \partial_t f^N + \xi \cdot \partial_{x_1} f^N = - \int_{w_{12}} f^N \xi \cdot n \quad (4.309)$$

Aplicando o teorema de Gauss a  $T[w_{12}] \cap R$ ,

$$\int_{w_{12}} f^N \xi \cdot n = - \int_{s_{12}^i} f^N \xi \cdot n - \int_{s_{12}^o} f^N \xi \cdot n + \int_{T[w_{12}] \cap R} \partial_t f^N \quad . \quad (4.310)$$

No limite das esferas rígidas, o integral sobre  $T[w_{12}] \subset T[w]$  tende para 0 (ver discussão na equação equação 4.275) e o integral sobre  $s_{12}^i$  tende para 0 (proposição 4.277). Substituindo em 4.309, e calculando  $\xi \cdot n$ ,

$$\frac{1}{N-1} \int_R \partial_t f^N + \partial_{x_1} f^N = \int_{s_{12}^o} f^N \Delta v \cdot n_1 \quad , \quad (4.311)$$

que é igual a 4.306.

### 4.6.5 Boltzmann e Stosszahlansätze

Parte-se da equação 4.306,

$$\int_R \partial_t f^N + v_1 \cdot \partial_{x_1} f^N = (N-1) \int_{s_{12}} f^N \Delta v \cdot n_1 \quad . \quad (4.312)$$

O fluxo através de  $s_{12}$  inclui trajectórias em pré( $\Delta v \cdot n_1 < 0$ ) e pós( $\Delta v \cdot n_1 > 0$ ) colisão. Faz-se a partição de  $s_{12}$  em  $s_{12}^+$  e  $s_{12}^-$ , conforme o sinal de  $\Delta v \cdot n_1$ . As superfícies  $s_{12}^-$  e  $s_{12}^+$  estão ligadas por uma transformação unitária. Parte-se de uma pré colisão  $Z \in s_{12}^-$ . A partir desta, gera-se um novo ponto  $Z'$ , trocando a posição da partícula 2 pela posição diametralmente oposta, em relação à posição da partícula 1. O resultado é um estado pós colisional, de momento final  $p_1$ . Ou seja,  $Z' \in s_{12}^+$ . Assim,  $s_{12}^+ = A(s_{12}^-)$ . Chama-se  $A$  a  $Z \rightarrow Z'$ . A transformação  $A$  é claramente unitária.

$$\int_{s^+} f^N \Delta v \cdot n_1 = \int_{A(s^-)} f^N \Delta v \cdot n_1 = - \int_{s^-} f^N \circ A \Delta v \cdot n_1 \quad , \quad (4.313)$$

onde se usou que  $A = A^{-1}$  e que  $n_1$  troca de sinal quando se compõe com  $A$ .

Assim,

$$\int_{s_{12}} f^N \Delta v \cdot n_1 = \int_{s^-} (f^N - f^N \circ A) \Delta v \cdot n_1 \quad (4.314)$$

Substituindo na equação acima,

$$\int_R \partial_t f^N + \partial_{x_1} f^N \cdot \xi = -(N-1) \int_{s^-} (f^N \circ A - f^N) \Delta v \cdot n_1 \quad . \quad (4.315)$$

A superfície é da forma  $s^- = \{z_1\} \times \hat{s}^- \times \Gamma_{3\dots N}$ , com  $\hat{s}^- = \{z_2 : |x_1 - x_2| = 2r \wedge \Delta v \cdot n_1 < 0\}$ . Fazendo as integrações triviais,

$$\partial_t f^1 + v_1 \cdot \partial_{x_1} f^1 = -(N-1) \int_{\hat{s}^-} (f^2 \circ A - f^2) \Delta v \cdot n_1 \quad (4.316)$$

Para eliminar a dependência em  $f^2$ , usa-se a hipótese de Stosszahlansätze.

**Hipótese 4.317** (Stosszahlansätze). *Sobre estados pré colisionais, a função  $f^2(z_1, z_2)$  factoriza em  $f^1(z_1)f^1(z_2)$ .*

O integral é feito sobre as pré-colisões. No entanto, o mapa  $A$  faz com que  $f^2$  esteja a actuar em pós colisões. Volta-se a usar a proposição 4.265 para fazer a substituição  $f^2 \circ A \rightarrow f^2 \circ \phi_{0-} \circ A$ .

$$\partial_t f^1 + v_1 \cdot \partial_{x_1} f^1 = -(N-1) \int_{\hat{s}^-} (f^2 \circ \phi_{0-} \circ A - f^2) \Delta v \cdot n_1 \quad (4.318)$$

Explicitamente, a diferença no integral é

$$f^2(x_1, p_1^*, x_1 - 2rn, p_2^*) - f^2(x_1, p_1, x_1 + 2rn, p_2) \quad . \quad (4.319)$$

Substitui-se o integral em  $\hat{s}^-$  por um integral em  $\hat{S}^+ = \{n : n \cdot \Delta v > 0\}$  e pelo integral nos momentos da partícula 2. O sinal – foi absorvido pela redefinição da normal.

$$\partial_t f + v_1 \cdot \partial_{x_1} f = (N-1)(2r)^2 \int_{p_2} \int_{\hat{S}^+} (f^2(x_1, p_1^*, x_1 + 2rn, p_2^*) - f^2(x_1, p_1, x_1 - 2rn, p_2)) \Delta v \cdot n \quad (4.320)$$

Usando a hipótese Stosszahlansätze, a diferença fica

$$f(x_1, p_1^*)f(x_1 + 2rn, p_2^*) - f(x_1, p_1)f(x_1 - rn, p_2) \quad . \quad (4.321)$$

Aplicando o limite de Boltzmann-Grad[27]

$$N \rightarrow \infty \quad , \quad Nr^2 \rightarrow \lambda \quad , \quad (4.322)$$

obtém-se a equação de Boltzmann 4.212. Substituiu-se  $x_1, p_1$  por  $x, p$ . A convergência deste limite é estudada em detalhe em [1, 28, 29].

# Equações Cinéticas Quânticas

A teoria de deformações diz que se pode quantizar (parcialmente) um sistema clássico deformando a álgebra de Poisson, no caso de sistemas de Poisson com espaço de fases finito.

Verificou-se que as 3 equações cinéticas resultam da dinâmica de sistemas de Poisson com espaço de estados de dimensão infinita, com uma função Hamiltoniana  $H$ , em que o parêntesis é construído usando o parêntesis de Poisson no espaço de fases de uma partícula. O impacto de  $H$  nas equações cinéticas vem de  $\mathcal{H} = \partial_f H$ . Fazendo  $\{\bullet, \bullet\} \rightarrow \{\bullet, \bullet\}^*$ , e  $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}^*$ , obtêm-se novas equações, que serão os ansätze para as equações quânticas. O argumento para identificar o resultado das substituições com o sistema quântico é que a substituição é uma deformação da álgebra de Poisson infinita construída utilizando o parêntesis de Moyal.

## 5.1 Deformações ingénuas

**Definição 5.1** (deformação ingénuas). Considere-se um sistema de Poisson, em que o estado inclui uma função  $f$  de um espaço  $\Omega = \Omega_X \times \Omega_P = \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ , e  $\{\{f, H\}\}$  é dado por

$$\{\{f, H\}\} = \int_{\Gamma} f \{ \partial_f f, \partial_f H \} \quad (5.2)$$

$$\mathcal{H} = \partial_f H \quad . \quad (5.3)$$

Chama-se à substituição

$$\{A, B\} \rightarrow \{A, B\}^* \quad (5.4)$$

**deformação ingénuas da álgebra de Lie.** Usa-se a notação  $\{\{A, B\}\}^*$  para o novo parêntesis.

**Definição 5.5** (quantização por deformação (ingénuas)). Fazendo a deformação ingénuas e a substituição

$$\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}^* \quad , \quad (5.6)$$

obtêm-se a **quantização por deformação** do sistema.

A substituição  $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}^*$  não é algorítmica. Ou seja, o mesmo sistema pode ter várias quantizações por deformação associadas, consoante a escolha que se faça para  $\mathcal{H}^*$ .

**Proposição 5.7.** Se as funções  $f, \mathcal{H} = \partial_f H$  forem suficientemente regulares, então a deformação ingénuas de um sistema de Poisson resulta na equação

$$\partial_t f + \{f, \mathcal{H}^*\} = -\{f, \mathcal{H}^*\}^\Delta \quad . \quad (5.8)$$

*Demonstração.*

$$\partial_t f = \{\{f, H^*\}\}^* = \int_{\Omega} f \{\partial_f f, \partial_f H^*\}^* \quad (5.9)$$

Tem-se que

$$\partial_f f = \mathbb{1} \quad (5.10)$$

$$\partial_f H^* = \mathcal{H}^* \quad (5.11)$$

Usando 3.42 e  $\{A, B\}^* = \frac{1}{i\hbar} (A \star B - B \star A)$ ,

$$\begin{aligned} \{\{f, H^*\}\}^* &= \frac{1}{i\hbar} \int_{\Omega} f (\mathbb{1} \star \mathcal{H}^* - \mathcal{H}^* \star \mathbb{1}) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_{\Omega} (\mathbb{1} \star \mathcal{H}^*) f - f (\mathcal{H}^* \star \mathbb{1}) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_{\Omega} (\mathbb{1} \star \mathcal{H}^*) \star f - f \star (\mathcal{H}^* \star \mathbb{1}) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_{\Omega} \mathbb{1} \star (\mathcal{H}^* \star f) - (f \star \mathcal{H}^*) \star \mathbb{1} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_{\Omega} \mathbb{1} (\mathcal{H}^* \star f) - (f \star \mathcal{H}^*) \mathbb{1} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_{\Omega} \mathbb{1} (\mathcal{H}^* \star f - f \star \mathcal{H}^*) = -\{f, \mathcal{H}^*\}^* \end{aligned} \quad (5.12)$$

Passando o termo de ordem 0 em  $\hbar$  para o lado esquerdo, obtém-se o resultado. Apesar de formalmente correcto, os integrais em cima envolvem derivadas de ordem arbitrária da função delta  $\delta$ . Espera-se portanto que seja necessário exigir condições de regularidade às funções  $f$  e  $\mathcal{H}$  para que os integrais convirjam.  $\square$

**Proposição 5.13.** *Se*

$$\mathcal{H}(X, P) = \mathcal{F}(P) + \mathcal{V}(X) \quad , \quad (5.14)$$

*então a deformação ingénua resulta na equação para  $\partial_t f$*

$$\partial_t f + \{f, \mathcal{H}\}^* = 0 \quad . \quad (5.15)$$

*Demonstração.* A escolha de  $\mathcal{H}^*$  é única, caso se use 5.7 e a linearidade da transformação de Wigner. Fica  $\mathcal{H}^* = \mathcal{H}$ .

Quer-se verificar se

$$\partial_t f = \{\{f, H\}\}^* \iff \partial_t f + \{f, \mathcal{H}\}^* = 0 \quad . \quad (5.16)$$

Podia usar-se a proposição 5.7 para obter o resultado directamente. Para não ser necessário usar o resultado 3.42, opta-se por usar uma demonstração alternativa.

A estratégia é começar do lado direito e mostrar que se obtém o lado esquerdo.

$$\partial_t f = \{\{f, H\}\}^* = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^n \int_{\Omega} p^{2n+1} (\partial_f f, \partial_f H) \quad , \quad (5.17)$$

usando 3.29.

$$\partial_f f = \mathbb{1} \quad (5.18)$$

$$\partial_f H = \mathcal{H} \quad (5.19)$$

$$(5.20)$$

De 3.45,

$$P^1 = \{f, \mathcal{H}\} \quad (5.21)$$

$$P^{2n+1}(f, \mathcal{H}) = - \sum_{|J|=2n+1} C(J) \partial_p^J f \partial_x^J g \quad , n \geq 1 \quad . \quad (5.22)$$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} f P^1(\mathbb{1}_z, \partial_f H) &= \int_{\Omega} f d_x \mathbb{1} \cdot d_p \mathcal{H} - f d_p \mathbb{1} \cdot d_x \mathcal{H} = \\ &-(d_x \cdot (f d_p \mathcal{H}) - d_p \cdot (f d_x \mathcal{H})) = -\{f, \mathcal{H}\} - f(d_x \cdot d_p \mathcal{H} - d_p \cdot d_x \mathcal{H}) = -\{f, \mathcal{H}\} \quad . \end{aligned} \quad (5.23)$$

Nota-se que não foi necessário utilizar hipótese nenhuma sobre  $\mathcal{H}$  para obter a equação acima, que resulta da divergência de um campo vectorial Hamiltoniano ser 0. Para os outros termos, é preciso separar  $\mathcal{H}(X, P) = \mathcal{T}(P) + \mathcal{V}(X)$ . Usando 3.50,

$$- \sum_{|J|=2n+1} C(J) \int_{\Omega} f \partial_p^J \mathbb{1} \partial_x^J \mathcal{V} = \quad (5.24)$$

$$\sum_{|J|=2n+1} C(J) \partial_p^J (f \partial_x^J \mathcal{V}) = \quad (5.25)$$

$$\sum_{|J|=2n+1} C(J) \partial_p^J (f) \partial_x^J \mathcal{V} = -P^{2n+1}(f, \mathcal{H}) \quad . \quad (5.26)$$

$$\sum_{|I|=2n+1} C(I) \int_{\Omega} f \partial_x^I \mathbb{1} \partial_p^I \mathcal{T} = \quad (5.27)$$

$$- \sum_{|I|=2n+1} C(I) \partial_x^I (f \partial_p^I \mathcal{T}) = \quad (5.28)$$

$$- \sum_{|I|=2n+1} C(I) \partial_x^I (f) \partial_p^I \mathcal{T} = -P^{2n+1}(f, \mathcal{T}) \quad . \quad (5.29)$$

□

## 5.2 Poisson-Vlasov

O sistema de Poisson-Vlasov é um sistema de Poisson, como se viu na proposição 4.204. Para obter a equação quântica, deforma-se ingenuamente.

**Proposição 5.30.** *O sistema de Poisson-Vlasov deformado é*

$$\partial_t f + \{f, \mathcal{H}\} = -q \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \left(\frac{\hbar}{2}\right)^{2n} \sum_{|J|=2n+1} C(J) \partial_p^J f \partial_x^J \phi \quad (5.31)$$

Com

$$\mathcal{H} = p_1^2/2m + q\phi(x_1) \quad (5.32)$$

$$\phi(x_1) = q \int_{\Gamma_2} f(z_2) V_{12} = \int_{x_2} \rho V_{12} \quad (5.33)$$

$$(5.34)$$

*Demonstração.* A proposição 5.13 aplica-se.

$$\partial_t f + \{f, \mathcal{H}\}^{\star} = 0 \quad (5.35)$$

$$\partial_t f + \{f, \mathcal{H}\} = -\{f, \mathcal{H}\}^{\Delta} \quad . \quad (5.36)$$

As derivadas no lado direito têm ordem pelo menos 3. Como  $\mathcal{T}$  é só função de  $p$  e é quadrático,  $\{f, \mathcal{T}\}^{\Delta} = 0$ . Obtém-se o resultado usando que  $\phi$  só depende de  $x$  e a proposição 3.45.

□

Caso se escolha usar um sistema unidimensional, o resultado coincide com o obtido em [8], pelo menos na primeira ordem de correcção. Pode-se converter para o espaço  $(x, v)$ , substituindo as derivadas nos momentos por derivadas na velocidade usando  $p = mv$ . Nesse caso,

$$\partial_t f + v \cdot \partial_x f - \frac{q}{m} \partial_x \phi \cdot \partial_v f = \frac{q}{m} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left( \frac{\hbar}{2m} \right)^{2n} \sum_{|J|=2n+1} C(J) \partial_v^J f \partial_x^J \phi \quad , \quad (5.37)$$

a que se chama **equação de Poisson-Vlasov quântica**. A primeira correcção é

$$\partial_t f + v \cdot \partial_x f - \frac{q}{m} \partial_x \phi \cdot \partial_v f = -\frac{q\hbar^2}{24m^3} \sum_{|J|=3} C(J) \partial_v^J f \partial_x^J \phi + O(\hbar^4) \quad (5.38)$$

Os multiíndices possíveis são  $J = (3, 0, 0), (0, 1, 2), (1, 1, 1)$  e respectivas permutações. Calculando explicitamente os termos do somatório,

$$\sum_{|J|=3} C(J) \partial_v^J f \partial_x^J \phi = \quad (5.39)$$

$$6\partial_{v_1} \partial_{v_2} \partial_{v_3} f \partial_{x_1} \partial_{x_2} \partial_{x_3} \phi + \left( \partial_{v_1}^3 f \partial_{x_1}^3 \phi + \partial_{v_2}^3 f \partial_{x_2}^3 \phi + \partial_{v_3}^3 f \partial_{x_3}^3 \phi \right) + \quad (5.40)$$

$$3 \left( \partial_{v_2} \partial_{v_3}^2 f \partial_{x_2} \partial_{x_3}^2 \phi + \partial_{v_3} \partial_{v_2}^2 f \partial_{x_3} \partial_{x_2}^2 \phi + \partial_{v_1} \partial_{v_3}^2 f \partial_{x_1} \partial_{x_3}^2 \phi + \partial_{v_1} \partial_{v_2}^2 f \partial_{x_1} \partial_{x_2}^2 \phi + \partial_{v_3} \partial_{v_1}^2 f \partial_{x_3} \partial_{x_1}^2 \phi + \partial_{v_2} \partial_{v_1}^2 f \partial_{x_2} \partial_{x_1}^2 \phi \right) \quad (5.41)$$

### 5.3 Maxwell-Vlasov

Maxwell-Vlasov é a variedade de Poisson definida em 4.148, com estado  $(f, E, B)$ . Pode-se portanto fazer a deformação ingénuo. Usando a proposição 5.7, obtém-se a equação cinética pretendida.

**estrutura de Poisson deformada** A deformação ingénuo do parêntesis de Poisson é dada pela substituição

$$\begin{aligned} \{F, G\}_{fAE} &= \int_{xp} f \{ \partial_f F, \partial_f G \}_{xp} + \int_x \partial_E F \cdot \partial_A G - \partial_A F \cdot \partial_E G \\ &\quad \downarrow \\ \{F, G\}_{fAE}^* &= \int_{xp} f \{ \partial_f F, \partial_f G \}_{xp}^* + \int_x \partial_E F \cdot \partial_A G - \partial_A F \cdot \partial_E G \quad . \end{aligned} \quad (5.42)$$

**quantização de  $H$**  Neste caso,  $\partial_f H = \mathcal{H} = \mathcal{T}$  não é dado por uma soma de funções  $f(x) + g(p)$ . Assim não se pode usar a proposição 3.110 para concluir que a única escolha razoável é  $\mathcal{T}^* = \mathcal{T}$ . Escolhe-se substituir o produto interno na definição da energia cinética. A energia quantizada é

$$\begin{aligned} \mathcal{T}(x, p) &= (p - A(x)) \cdot (p - A(x))^2 / (2m) \\ \mathcal{T}^*(x, p) &= (p - A(x)) \star (p - A(x)) / (2m) \quad . \end{aligned} \quad (5.43)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{T}^* &= (p - A) \star (p - A) / (2m) \\ &= p \star p + p \star A + A \star p + A \star A = p^2 + p \star A + A \star p + A^2 \quad . \end{aligned} \quad (5.44)$$

Os operadores  $P^{2n+1}$  são anti simétricos. Logo,

$$p \star A + A \star p = 2p \cdot A + P^2(p, A) \quad . \quad (5.45)$$

Como  $p$  é linear,  $P^2(p, \bullet) = 0$ . Assim,  $\mathcal{T}^* = \mathcal{T}$ . Ou seja, apesar de não se estar nas condições da proposição 5.13, a escolha natural para a quantização de  $\mathcal{T}$  levou ao mesmo resultado.

As equações de Maxwell dinâmicas são insensíveis à deformação, já que  $\partial_f E = 0, \partial_f B = 0$ . Usando a proposição 4.17, resulta que as equações não dinâmicas são verificadas ao longo da trajectória. Em particular, a equação de continuidade para a carga continua verificada. Usa-se a proposição 5.7.

$$\partial_t f + \{f, \mathcal{T}\} = -\{f, \mathcal{T}\}^\Delta \quad . \quad (5.46)$$



O lado esquerdo resulta na equação de Vlasov, usando o que se fez em 4.148. O lado direito são portanto as correcções quânticas.

$$\mathcal{V}lasov^*(f, E, B) = 0 \iff \mathcal{V}lasov(f, E, B) = -\{f, \mathcal{F}\}^\Delta, \quad (5.47)$$

onde  $\mathcal{V}lasov^*$  é a equação de Vlasov deformada. A energia cinética é dada por

$$2m\mathcal{F} = q^2A^2 - 2qp \cdot A + p^2. \quad (5.48)$$

Para os termos sem dependências cruzadas usa-se 3.50 e fica

$$\{f, q^2A^2 + p^2\}^\Delta = q^2\{f, A^2\}^\Delta = \quad (5.49)$$

$$= -q^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^{2n} \sum_{|J|=2n+1} C(J) \partial_p^J f \partial_x^J A^2 \quad (5.50)$$

Para  $p \cdot A$  tem de se usar a fórmula completa.

$$\{f, p \cdot A\}^\Delta = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^{2n} \overbrace{\sum_{|I+J|=2n+1} (-1)^{|J|} \binom{2n+1}{|J|} C(I)C(J) \partial_x^I \partial_p^J f \partial_x^I \partial_p^J p \cdot A}^{P^{2n+1}(f, p \cdot A)} \quad (5.51)$$

Como a função  $p \cdot A$  é linear em  $p$ , só sobrevivem multi índices  $I$  com  $|I| \leq 1$ .

$$P^{2n+1}(f, p \cdot A) = - \sum_{|J|=2n+1} C(J) \partial_p^J f \partial_x^J p \cdot A + \sum_{|I|=1} (2n+1) \sum_{|J|=2n} \binom{2n+1}{|J|} C(J) \partial_x^I \partial_p^J f \partial_x^I \partial_p^J p \cdot A \quad (5.52)$$

$$= - \sum_{|J|=2n+1} C(J) \partial_p^J f \partial_x^J p \cdot A + (2n+1) \sum_i^3 \sum_{|J|=2n} C(J) \partial_p^J \partial_{x_i} f \partial_x^J A_i \quad (5.53)$$

A correcção total é

$$\begin{aligned} -\{f, \mathcal{F}\}^\Delta &= \frac{q}{2m} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^{2n} \sum_{|J|=2n+1} C(J) \partial_p^J f \partial_x^J (qA^2 - 2p \cdot A) \\ &\quad + 2(2n+1) \sum_i^3 \sum_{|J|=2n} C(J) \partial_p^J \partial_{x_i} f \partial_x^J A_i. \end{aligned} \quad (5.54)$$

As derivadas presentes nas equações acima são da forma  $\partial_x^p, \partial_p^x$ . A equação de de Vlasov típica é escrita no espaço  $(x, v)$ . Relembrando o que se fez em 4.148, deve-se converter as derivadas e a densidade para obter a correcção quântica no espaço de velocidades.

$$f^v = \frac{1}{m^3} f \quad (5.55)$$

$$\partial_x^v A(x) = \partial_x^p A(x) = \partial_x A(x) \quad (5.56)$$

$$\partial_x^p = \partial_x^v - \frac{q}{m} \partial_x A \cdot \partial_v^x \quad (5.57)$$

$$\partial_p^x = \frac{1}{m} \partial_v^x \quad (5.58)$$

Nota-se que no primeiro termo da correcção as derivadas  $\partial_x^p$  são aplicadas a  $(qA^2 - 2p \cdot A)$ . Como  $\partial_x^p p = 0$ , pode-se substituir esse termo pela energia cinética total,  $\mathcal{F} = \frac{1}{2}mv^2$ .

$$\partial_x^p \mathcal{F} = \partial_x^v \mathcal{F} - \frac{q}{m} \partial_x A \cdot \partial_v^x \mathcal{F} = -\frac{q}{m} \partial_x A \cdot \partial_v^x \mathcal{F}. \quad (5.59)$$

As derivadas que se aplicam a  $\mathcal{F}$  são todas de ordem pelo menos 3. Como  $\mathcal{F}$  é quadrático nas velocidades, fica 0. Para o segundo termo,

$$\partial_x^p f = \partial_x^v f - \frac{q}{m} \partial_x A \cdot \partial_v^x f \quad (5.60)$$

Juntando tudo, fica

$$\partial_t f^v + v \cdot \partial_x f^v + \frac{q}{m}(E + v \times B) \cdot \partial_v f^v = \frac{q}{m} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left( \frac{\hbar}{2m} \right)^{2n} \sum_i^3 \sum_{|J|=2n} C(J) \partial_v^J \left( \partial_x f^v - \frac{q}{m} \partial_x A \cdot \partial_v f^v \right)_i \partial_x^J A_i \quad , \quad (5.61)$$

a que se chama **equação de Maxwell-Vlasov Quântica**. A primeira correcção é de ordem de  $\hbar^2$ ,

$$\partial_t f^v + v \cdot \partial_x f^v + \frac{q}{m}(E + v \times B) \cdot \partial_v f^v = -\frac{q\hbar^2}{8m^3} \sum_i^3 \sum_{|J|=2} C(J) \partial_v^J \left( \partial_x f^v - \frac{q}{m} \partial_x A \cdot \partial_v f^v \right)_i \partial_x^J A_i + P(\hbar^4) \quad . \quad (5.62)$$

O somatório em  $J$  inclui em apenas 6 termos, correspondentes às permutações dos multi-índices (2, 0, 0), (1, 1, 0).

$$\begin{aligned} & \sum_{|J|=2} C(J) \partial_v^J \left( \partial_x f^v - \frac{q}{m} \partial_x A \cdot \partial_v f^v \right)_i \partial_x^J A_i = \\ & \partial_{v_1}^2 \left( \partial_x f^v - \frac{q}{m} \partial_x A \cdot \partial_v f^v \right) \partial_{x_1}^2 A_i + \partial_{v_2}^2 \left( \partial_x f^v - \frac{q}{m} \partial_x A \cdot \partial_v f^v \right) \partial_{x_2}^2 A_i + \partial_{v_3}^2 \left( \partial_x f^v - \frac{q}{m} \partial_x A \cdot \partial_v f^v \right) \partial_{x_3}^2 A_i + \\ & 2(\partial_{v_2} \partial_{v_3} \left( \partial_x f^v - \frac{q}{m} \partial_x A \cdot \partial_v f^v \right) \partial_{x_2} \partial_{x_3} A_i + \partial_{v_1} \partial_{v_3} \left( \partial_x f^v - \frac{q}{m} \partial_x A \cdot \partial_v f^v \right) \partial_{x_1} \partial_{x_3} A_i + \\ & \partial_{v_1} \partial_{v_2} \left( \partial_x f^v - \frac{q}{m} \partial_x A \cdot \partial_v f^v \right) \partial_{x_1} \partial_{x_2} A_i) \end{aligned} \quad (5.63)$$

## 5.4 Boltzmann

Concluiu-se que 4.212 é um caso limite de um sistema com um Hamiltoniano suave. Dividiu-se o limite em 2 passos, o limite de esferas rígidas e o limite de Boltzmann-Grad. Para obter uma equação de Boltzmann quântica, deforma-se a estrutura de Poisson estatística . Havendo dúvidas na notação, refere-se a secção dedicada à equação de Boltzmann Clássica.

**Hierarquia BBGKY quântica** Usando a proposição 5.7, sabe-se que o resultado da deformação é a substituição na equação de Liouville no espaço  $6N$  do parêntesis de Poisson pelo parêntesis de Moyal.

$$\begin{aligned} \partial_t f^N + \{f^N, \mathcal{H}\}^* &= 0 \iff \\ \partial_t f^N + \frac{P}{m} \cdot \partial_X f^N &= -\{f^N, \mathcal{V}\}^* \quad , \end{aligned} \quad (5.64)$$

onde

$$\mathcal{V}(X) = \sum_{i \neq j} V_{ij} \quad , \quad V_{ij} = V(|x_i - x_j|) \quad (5.65)$$

$$\{f, g\}_i^* = \sum_i^N \{f, g\}_i^* \quad . \quad (5.66)$$

$\{f, g\}_i^*$  é construído com as derivadas em ordem a  $z_i$ . A equação para a evolução da função marginal  $f^1$  clássica é 4.121. Foi obtida usando 2 propriedades da equação de continuidade:  $\mathcal{V}$  é uma soma sobre pares, e  $\{f, \mathcal{H}\}_i$  é uma divergência nas coordenadas da partícula  $i$ ,

$$\{f^N, \mathcal{H}\}_i = \partial_{z_i} \cdot (f^N X_{\mathcal{H}}) \quad . \quad (5.67)$$

No caso quântico, a energia tem a mesma forma e o parêntesis de cada partícula também é dado por uma divergência,

$$\{f^N, \mathcal{H}\}_i^* = \partial_{z_i} \cdot (X^-(f^N, \mathcal{H})) \quad , \quad (5.68)$$

onde o campo vectorial Hamiltoniano  $X^-$  está definido em 3.39. Assim, podem seguir-se exactamente os mesmos passos que levaram à equação 4.121. Obtém-se

$$\begin{aligned} \partial_t f^1 + v \cdot \partial_x f^1 &= -(N-1) \int_{\Gamma_2} \{f_2, V_{12}\}_1^* = \\ &= -(N-1) \int_{\Gamma_2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^{2n} \underbrace{\partial_{z_1} \cdot P_1^{2n}(f^2, \Lambda \cdot \partial_{z_1} V_{12})}_{-\partial_{p_1} \cdot P_1^{2n}(f^2, \partial_{x_1} V_{12})} . \end{aligned} \quad (5.69)$$

**Equação de Boltzmann Quântica** O potencial  $V_{12}$  só depende de  $|x_1 - x_2|$ , logo  $\partial_{x_1} V_{12} = -\partial_{x_2} V_{12}$ . Para além disso o potencial é colisional e a integração feita percorre todo o domínio  $\Gamma_2$  das coordenadas da partícula 2. Integrando por partes, transferem-se as derivadas de  $V_{12}$  para  $f^2$ .

$$-\partial_{p_1} \cdot \int_{\Gamma_2} P_1^{2n}(f^2, \partial_{x_1} V_{12}) = -(-1)^{2n+1} \partial_{p_1} \cdot \int_{\Gamma_2} \sum_{|J|=2n} C(J) \partial_{p_1}^J f^2 \partial_{x_2}^J \partial_{x_1} V_{12} \quad (5.70)$$

$$= 0 + (-1)^{2n+1} \partial_{p_1} \cdot \int_{\Gamma_2} \left( \sum_{|J|=2n} C(J) \partial_{x_2}^J \partial_{p_1}^J f^2 \right) \partial_{x_1} V_{12} = -\partial_{p_1} \cdot \int_{\Gamma_2} \left( \sum_{|J|=2n} C(J) \partial_{x_2}^J \partial_{p_1}^J f^2 \right) \partial_{x_1} V_{12} \quad (5.71)$$

O integral acima depende linearmente do potencial. Se se fizesse já o limite  $\gamma \rightarrow \infty$ , ficaria indefinido. Segue-se a estratégia usada no caso clássico: integra-se a equação numa região  $R_1$  e nota-se que o termo que inclui os efeitos da interacção são fluxos. Usando o teorema de Gauss numa região apropriada, substitui-se o integral 5.70 de tal forma que a dependência linear em  $\gamma$  deixa de aparecer explicitamente. Lembra-se que  $f^2$  é a integração de  $f^N$  sobre as coordenadas de todas as partículas menos as duas primeiras. Desfazendo essa integração,  $f^N$  surge de novo no lugar de  $f^2$ . Integra-se 5.70 num cubo  $R_1$  centrado em  $(x_1, p_1)$ . Define-se a região  $R = R_1 \times \Gamma_2 \times \dots \times \Gamma_N$ .

$$\int_R \partial_{p_1} \cdot \left( \sum_{|J|=2n} C(J) \partial_{x_2}^J \partial_{p_1}^J f^N \right) \partial_{x_1} V_{12} = \int_{\partial R_{p_1}} \left( \sum_{|J|=2n} C(J) \partial_{x_2}^J \partial_{p_1}^J f^N \right) \partial_{x_1} V_{12} \cdot n \quad , \quad (5.72)$$

onde  $n$  aponta na direcção de variação de cada uma das coordenadas de  $p_1$ , conforme a face da superfície  $\partial R_{p_1}$ . A partir daqui, a discussão é análoga à feita na secção 4.6.4. Volta-se a usar a superfície  $w_{12}$  que é a porção de  $\partial R_{p_1}$  em que a partícula 1 está em interacção (clássica) exclusiva com a partícula 2. Em  $w_{12}$  pode-se substituir  $\partial_{x_1} V_{12} \cdot n$  por  $-\Lambda \cdot \partial_Z \mathcal{H} \cdot n = -X_{\mathcal{H}} \cdot n$ , tal como se fez no caso clássico.

Os termos correctivos são todos fluxos através de  $w_{12}$  de correntes do tipo  $g^n X_{\mathcal{H}}$ , com  $g^n$  uma função obtida de  $f^N$ . Somando todas as funções  $g^n$ , obtém-se uma "corrente de densidade quântica",

**Definição 5.73** (corrente de densidade quântica).

$$g[f^N] = f^N + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^{2n} \sum_{|J|=2n} C(J) \partial_{x_2}^J \partial_{p_1}^J f^N \quad . \quad (5.74)$$

Substituindo na equação 5.69,

$$\int_{R_1} \partial_t f^1 + v_1 \cdot \partial_{x_1} \cdot f^1 = -(N-1) \int_{w_{12}} g[f^N] X_{\mathcal{H}} \cdot n \quad (5.75)$$

Esta equação é idêntica a 4.308, trocando  $f^N$  por  $g[f^N]$ . Para que o termo de ordem 0 em  $\hbar$  coincida com o termo clássico, assume-se a hipótese,

**Hipótese 5.76.**

$$\lim_{r_i \rightarrow r_o} X_{\mathcal{H}} \cdot \partial_Z g[f^N] < \infty \quad (5.77)$$

**Nota 5.78.** A justificação da hipótese é pragmática: permite seguir os passos clássicos substituindo  $f^N$  por  $g[f^N]$ . No caso clássico, resulta da proposição 4.265, que usa que  $f^N$  é uma constante de movimento, interpretando a equação de Liouville como uma derivada material. No caso quântico a equação de Liouville não é verificada, pelo que não se pode usar o mesmo argumento.

Em particular, a hipótese implica o resultado análogo a 4.267,

$$\left( g[f^N] - g[f^N] \circ \phi_{0^+} \right) \Big|_{S^{i,o}} = 0 \quad . \quad (5.79)$$

Seguindo os passos que levam até 4.311,

$$\int_{R_1} \partial_t f^1 + v_1 \cdot \partial_{x_1} f^1 = (N-1) \int_s g[f^N] X_{\mathcal{H}} \cdot n = (N-1) \int_s g[f^N] \Delta v \cdot n \quad . \quad (5.80)$$

O termo colisional já não tem a dependência linear em  $\gamma$ , a altura do degrau do potencial. Faz-se exactamente o mesmo que na secção 4.6.5 substituindo  $f^2$  por  $g[f^2]$ . O resultado é

$$\begin{aligned} \partial_t f_t^1(x, p) + v \cdot \partial_x f_t^1(x, p) &= \lambda \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \left( \frac{i\hbar}{2} \right)^{2n} \sum_{|J|=2n} C(J) \\ &\quad \int_{p_2} \int_{\hat{S}^+} \left( \partial_x^J f^1 \Big|_{x, p^*} \partial_p^J f^1 \Big|_{x, p_2^*} - \partial_x^J f^1 \Big|_{x, p} \partial_p^J f^1 \Big|_{x, p_2} \right) \Delta v \cdot n \quad , \quad (5.81) \end{aligned}$$

a que se chama a **equação de Boltzmann Quântica para esferas rígidas**. Nota-se que o termo com  $n=0$  é o termo clássico  $Q(f)$ . Pondo em evidência a primeira correcção com  $n=1$ ,

$$\begin{aligned} \partial_t f_t^1(x, p) + v \cdot \partial_x f_t^1(x, p) &= \\ Q(f) - \frac{\lambda \hbar^2}{24} \sum_{|J|=2} C(J) \int_{p_2} \int_{\hat{S}^+} &\left( \partial_x^J f^1 \Big|_{x, p^*} \partial_p^J f^1 \Big|_{x, p_2^*} - \partial_x^J f^1 \Big|_{x, p} \partial_p^J f^1 \Big|_{x, p_2} \right) \Delta v \cdot n + O(\hbar^4) \quad . \quad (5.82) \end{aligned}$$

## Conclusões

As 3 equações cinéticas revelaram-se estruturas de Poisson. Utilizando a teoria das deformações como motivação, foi possível obter ansätze quânticos nos 3 casos. Obteve-se as correcções quânticas em todas as ordens de  $\hbar$ . No caso de aplicações típicas de plasmas, não se espera que as ordens superiores tenham muita importância. Nesse regime, pode-se interpretar  $f$  como uma função de distribuição clássica. Ou seja, as condições iniciais para o problema são as mesmas que se escolheriam para o problema clássico. A diferença está na equação para a evolução de  $f$ . Caso seja expectável algum efeito quântico alteram-se a equação para  $\partial_t f$ , com tantas ordens em  $\hbar$  quanto se queira. Espera-se que a correcção na interpretação de  $f$  seja em ordens superiores em  $\hbar$  em relação à correcção na equação para  $\partial_t f$ . No caso de  $f_t$  obtido se afastar muito do caso clássico, é necessário rever a interpretação física.

Seria interessante consolidar a noção de deformação de estruturas de Poisson infinitas. No caso de Maxwell-Vlasov, tem-se mais diversidade na deformação potencial, já que o parêntesis não é construído apenas a partir do parêntesis de Poisson.

A convergência do limite de Boltzmann-Grad para a equação de Boltzmann não é trivial, mesmo no caso clássico. Fica por fazer um estudo rigoroso deste limite no caso quântico. Em particular, a hipótese 5.76 merece uma investigação mais cuidada. Fica também por fazer a generalização para interacções de outro tipo.



# Bibliografia

- [1] Isabelle Gallagher, Laure Saint-Raymond e Benjamin Texier. “From Newton to Boltzmann: hard spheres and short-range potentials”. Em: *arXiv preprint arXiv:1208.5753* (2012).
- [2] Giovanni Manfredi. “How to model quantum plasmas”. Em: *Fields Inst. Commun* 46 (2005), pp. 263–287.
- [3] José E Moyal. “Quantum mechanics as a statistical theory”. Em: *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*. Vol. 45. 1. Cambridge University Press. 1949, pp. 99–124.
- [4] François Bayen et al. “Deformation theory and quantization. I. Deformations of symplectic structures”. Em: *Annals of Physics* 111.1 (1978), pp. 61–110.
- [5] Maxim Kontsevich. “Deformation quantization of Poisson manifolds”. Em: *Letters in Mathematical Physics* 66.3 (2003), pp. 157–216.
- [6] François Bayen et al. “Quantum mechanics as a deformation of classical mechanics”. Em: *Letters in Mathematical Physics* 1.6 (1977), pp. 521–530.
- [7] Daniel Sternheimer. “Deformation theory: a powerful tool in physics modelling”. Em: *Poisson geometry, deformation quantisation and group representations* (2003), pp. 325–354.
- [8] Fernando Haas. “An introduction to quantum plasmas”. Em: *Brazilian Journal of Physics* 41.4-6 (2011), pp. 349–363.
- [9] A Cannas Da Silva. “Lectures on symplectic geometry”. Em: *Lecture Notes* (2000).
- [10] William Be Case. “Wigner functions and Weyl transforms for pedestrians”. Em: *American Journal of Physics* 76.10 (2008), pp. 937–946.
- [11] Jerrold E Marsden e Alan Weinstein. “The Hamiltonian structure of the Maxwell-Vlasov equations”. Em: *Physica D: nonlinear phenomena* 4.3 (1982), pp. 394–406.
- [12] François Bayen et al. “Deformation theory and quantization. II. Physical applications”. Em: *Annals of Physics* 111.1 (1978), pp. 111–151.
- [13] Michael Spivak. “A comprehensive introduction to differential geometry. Volume four”. Em: (1979).
- [14] Jerrold E Marsden e Tudor S Ratiu. *Introduction to mechanics and symmetry: a basic exposition of classical mechanical systems*. Vol. 17. Springer Science & Business Media, 2013.
- [15] Ralph Abraham e Jerrold E Marsden. *Foundations of mechanics*. Vol. 36. Benjamin/Cummings Publishing Company Reading, Massachusetts, 1978.
- [16] Tom M Apostol. *Calculus, vol 1: one-variable calculus, with an introduction to linear algebra*. 1967.
- [17] Richard Chace Tolman. *The principles of statistical mechanics*. Courier Corporation, 1938.
- [18] Oliver Penrose. “Foundations of statistical mechanics”. Em: *Reports on Progress in Physics* 42.12 (1979), p. 1937.
- [19] Chiara Esposito. *Formality Theory: From Poisson Structures to Deformation Quantization*. Vol. 2. Springer, 2014.
- [20] R Vilela Mendes. “Deformations, stable theories and fundamental constants”. Em: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 27.24 (1994), p. 8091.
- [21] Moshe Flato. “Deformation view of physical theories”. Em: *Czechoslovak Journal of Physics* 32.4 (1982), pp. 472–475.

- [22] Dwight Roy Nicholson. *Introduction to plasma theory*. Wiley New York, 1983.
- [23] Kurt Otto Friedrichs. “The identity of weak and strong extensions of differential operators”. Em: *Transactions of the American Mathematical Society* 55.1 (1944), pp. 132–151.
- [24] N. D. Naumov. “Kinetic theory of a relativistic plasma”. Em: *Fizika* 24 (#mar# de 1981), pp. 78–82.
- [25] John David Jackson. “From Lorenz to Coulomb and other explicit gauge transformations”. Em: *arXiv preprint physics/0204034* (2002).
- [26] John David Jackson e Lev Borisovich Okun. “Historical roots of gauge invariance”. Em: *Reviews of Modern Physics* 73.3 (2001), p. 663.
- [27] Carlo Cercignani. “On the Boltzmann equation for rigid spheres”. Em: *Transport Theory and Statistical Physics* 2.3 (1972), pp. 211–225.
- [28] Reinhard Illner e Mario Pulvirenti. “Global validity of the Boltzmann equation for a two-dimensional rare gas in vacuum”. Em: *Communications in Mathematical Physics* 105.2 (1986), pp. 189–203.
- [29] Oscar E Lanford. “Time evolution of large classical systems”. Em: *Dynamical systems, theory and applications*. Springer, 1975, pp. 1–111.