Relatório de Iniciação Científica
à Direção do Curso de Ciências Moleculares

Aluno: Alexandre Hannud Abdo
Orientador: Prof. Dr. Celso Grebogi

São Paulo, Dezembro de 2002

1 Ler livros fez de Quixote um cavalheiro...

Primeiro semestre: estudo e familiarização com as idéias de difusão determinística e controle do caos e targeting. Segundo semestre: tentativa de conciliar as idéias usando os métodos tradicionais, ao final do semestre demonstrou-se sua inviabilidade. A proposta para o terceiro semestre era então de procurar novos meios de tratar o problema, partindo de algumas idéias que haviam surgido no primeiro semestre. Tudo isso consta em maiores detalhes nos relatórios anteriores.

2 ...acreditar no que lia fez dele um louco

Este terceiro semestre começou com minha participação no Seminário e Workshop "Microscopic Chaos and Transport in Many-Particle Systems" [6], organizado pelo "Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme" em Dresden, Alemanha. Durante o seminário ocorreram dois fatos importantes para minha iniciação: despertou meu interesse pelo assunto dos "Fluctuation Theorems", e concretizaram-se, através de discussão e meditação contínuas com os colegas ali presentes, as idéias sobre a nova abordagem para o problema de targeting simultâneo. Desta forma, os meses que se seguiram foram dedicados a um breve estudo dos Fluctuation Theorems e à implementação numérica da simulação que testará o novo método.

3 Dom Quixote

O método consiste em lidar com um número finito de partículas distribuídas num conjunto de estados possíveis, de forma que por um lado um número pequeno possa ser controlado apenas distribuindo-se os sinais de targeting de cada partícula no tempo, da forma que menos prejudicar as demais, e por outro lado um número grande de partículas possa ser reduzido ao caso de um número pequeno pelo fato dos sinais de targeting possíveis para cada partícula serem sempre intervalos, cuja chance de intersectarem-se crescerá com o número de

partículas.
Como a intenção é testar uma idéia, tentaremos fazê-lo inicialmente no sistema difusivo mais simples concebível, o mesmo estudado em [3,4]. Tratar-se-á um número finito de partículas cujos estados possíveis são pontos na reta real, e que evoluem segundo a iteração da seguinte função descontínua que representa um processo difusivo:

$$M_\lambda(x) = \left\{ \begin{array}{ccc} \lfloor x \rfloor + \lambda(x - \lfloor x \rfloor) & , & 0 \leq \lfloor x \rfloor < \frac{1}{2} \\ \lfloor x \rfloor + 1 - \lambda(\lfloor x \rfloor + 1 - x) & , & \frac{1}{2} \leq \lfloor x \rfloor < 1 \end{array} \right\} \; , \; \lambda \geq 2$$

No mecanismo de targeting, o parâmetro λ pode ser variado num pequeno intervalo $[\lambda - \delta, \lambda + \delta]$ de forma que uma partícula num determinado estado irá, após uma iteração, passar a ocupar um estado dentro do intervalo de estados permitidos pela variação do parâmetro, segundo a escolha que fizermos. Portanto são necessários dois passos para o programa: ser capaz de iterar a função para várias partículas e com um parâmetro flexível, e conseguir escolher inteligentemente o parâmetro de cada iteração, sabendo alterná-lo e otimizá-lo como proposto.

3.1 O Moinho

O primeiro passo é trivial e já está implementado. O segundo porém é mais complexo e requer cuidado, ainda mais porque a natureza descontínua do sistema traz complicações extras. O algoritmo de targeting para sistemas contínuos unidimensionais, descrito em [2], é razoavelmente direto e dispensa grandes malabarismos computacionais pois a aritmética de intervalos necessária para estimar a variação do parâmetro é simples, uma vez que a imagem de 1 intervalo por uma função contínua é sempre 1 intervalo. Por exemplo, o primeiro passo do algoritmo, verificar se um ponto está contido na imagem da enésima iterada de um intervalo: caso a função não seja muito irregular, é facílimo de ser calculado pois a imagem é um outro intervalo que depende apenas das imagens das extremidades e do máximo e mínimo das consecutivas imagens do intervalo.
Para sistemas discontínuos, imaginemos a seguinte situação: um intervalo $[a, b]$, que contenha apenas um ponto de descontinuidade x_d, terá na sua imagem dois intervalos, o primeiro formado pela imagem de $[a, x_d)$ e o segundo pela imagem de $(x_d, b]$, sendo que um desses intervalos será fechado em x_d para uma dada função. Esse é o caso mais simples possível. Num caso geral, é impossível saber a priori, isto é, sem iterar cada passo usando uma regra ou tabela que descreva todos os pontos de descontinuidade da função, quantos intervalos serão gerados após um número qualquer de iteradas. Somado a isso, temos o fato de que estamos lidando com um número arbitrário de partículas, cujas imagens terão um número de intervalos diferentes entre si, e que se beneficiariam de ser processadas paralelamente pois em alguns casos não é necessário saber o número de iteradas para o qual cada partículas atinge seu alvo, mas apenas para a maioria ou um grupo específico. Portanto as estruturas sobre as quais o algoritmo será montado necessitam ser muito mais flexíveis e portanto mais complexas, além de requererem processos internos à estrutura que dependem da função em questão.
Durante o semestre foram feitas as estruturas e o algoritmo de iteração do sistema de partículas, de forma que falta terminar o algoritmo que escolhe o parâmetro. Este algoritmo tem três partes, a regra que define as descontinuidades, a função que, utilizando essa regra, itera intervalos, e a função onde

está contido o critério de escolha dos parâmetros, que utiliza-se da anterior. A primeira parte está concluída, a segunda está em desenvolvimento, e a terceira ainda requer um pouco de trabalho, mais porque a segunda ainda não foi terminada para ter-se as definições necessárias do que por alguma dificuldade própria.

4 Sancho Pança

O 'Fluctuation Theorem', chamado "teorema da flutuação-dissipação" por aqui e que na verdade é um conjunto de teoremas proximamente relacionados, é a solução para o problema centenário de conciliar a segunda lei da termodinâmica com as leis da mecânica clássica. Essencialmente, como pode um sistema ter uma dinâmica microscópica reversível, mas ter propriedades macroscópicas irreversíveis? Uma boa discussão do assunto, tanto para introdução como aprofundamento, e que já discute os experimentos feitos recentemente na Austrália pode ser encontrada em [7].
Em suma, o Teorema mostra que, para sistemas grandes ou observados por um longo tempo, a probabilidade da segunda lei da termodinâmica estar sendo satisfeita é enorme, crescendo exponencialmente com o tamanho do sistema e o tempo de observação. Ou seja, ele não só resolve o problema da irreversibilidade, como também provê uma maneira de quantificar a probabilidade da segunda lei ser violada, de forma que os fãs daquela que é "talvez a mais pessimista e amoral formulação em todo o pensamento humano" [8] podem dormir contentes....

5 Será

Será que amanhã ainda existe para ti,
ou ao ver-te nos olhos te beijei e morri.
Será que lá fora os carros passam ainda,
ou as estrelas caíram e qualquer sorte é bem-vinda.
Será que a cidade ainda está como dantes
ou cantam fantasmas e bailam gigantes.
Será que o sol se põe do lado do mar,
ou a luz que me agarra é sombra de luar.
Será que as casas cantam e as pedras do chão,
ou calou-se a montanha, rendeu-se o vulcão.
-Pedro Abrunhosa

O começo de 2003 será destacadamente dedicado à programação do simulador e, após sua conclusão, ao estudo de outros tópicos relacionados buscando também encontrar um tema para pós-graduação no segundo semestre. Quando o programa estiver completo, espera-se por volta de Março, serão analisados os resultados, após o que ainda serão testadas abordagens levemente variantes à apresentada, tanto com o intuito de melhorar a performance como com o de gerar uma base de comparação para o método. Com isso, e com uma eventual busca por aplicações caso o método funcione, estará concluído o programa de iniciação científica.

Referências

[1] T. Shinbrot, E. Ott, C. Grebogi, J.A. Yorke, Using Chaos to Direct Trajectories to Targets, Phys. Rev. Lett. 65 (1990) 3215-3218

[2] T. Shinbrot, E. Ott, C. Grebogi, J.A. Yorke, Using chaos to direct orbits to targets in systems describable by a one-diensional map, Phys. Rev. A 45 (1992) 4165-4168

[3] R. Klages, Simple Maps with Fractal Diffusion Coefficients, Phys. Rev. Lett. 74 (1995) 387-390

[4] R. Klages, J.R. Dorfman, Simple deterministic dynamical systems with fractal diffusion coefficients, Phys. Rev. E (1999) 5361-5383

[5] R. Klages, Deterministic Diffusion in One-Dimensional Chaotic Dynamical Systems, Wissenschaft und Technik Verlag (1996) ISBN 3-928943-49-9

[6] Microscopic Chaos and Transport in Many-Particle Systems (http://www.mpipks-dresden.mpg.de/ chaotran/), Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme, Dresden, Alemanha

[7] D. Evans, D. Searles, The Fluctuation Theorem, Advances in Physics, 2002, Vol. 51, No. 7, 1529-1585. Disponível para download em http://rsc.anu.edu.au/~evans/

[8] Bergan Evans, em artigo sobre Norbert Weiner. Uma citação do texto pode ser encontrada em “Principia Discordia”, por Malaclypse The Younger, ISBN: 0-9626534-2-X

Alexandre Hannud Abdo

Prof. Dr. Celso Grebogi