

Calvin Alexandre Fracassi Farias

**Estudo do potencial de Yukawa no limite  
termodinâmico e relaxação para estados  
quasi-estacionários**

Porto Alegre

2016, Novembro

Calvin Alexandre Fracassi Farias

## **Estudo do potencial de Yukawa no limite termodinâmico e relaxação para estados quasi-estacionários**

Monografia elaborada sob orientação do professor Yan Levin; apresentada como requisito para a conclusão do curso de Bacharelado em Física pelo Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRGS

Instituto de Física

Orientador: Yan Levin

Porto Alegre

2016, Novembro

Calvin Alexandre Fracassi Farias

## **Estudo do potencial de Yukawa no limite termodinâmico e relaxação para estados quasi-estacionários**

Monografia elaborada sob orientação do professor Yan Levin; apresentada como requisito para a conclusão do curso de Bacharelado em Física pelo Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Trabalho aprovado. Porto Alegre, Novembro de 2016:

---

**Yan Levin**  
Orientador

---

**Mendeli Henning Vainstein**  
Convidado 1

---

**Renato Pakter**  
Convidado 2

Porto Alegre  
2016, Novembro

*“On the obverse of the medal, Archimedes is shown in right-facing profile  
together with the inscription  
TRANSIRE SUUM PECTUS MUNDOQUE POTIRI  
(Rise above oneself and grasp the world)”.*  
*Cédric Villani, Birth of a Theorem: A Mathematical Adventure*

# Resumo

FARIAS, C. A. F. **Estudo do potencial de Yukawa no limite termodinâmico e relaxação para estados quasi-estacionários**

Sistemas com interações de longo-alcance apresentam uma dinâmica diferente daqueles com interações de curto-alcance e, no limite termodinâmico, nem sempre apresentam ergodicidade ou equivalência entre os ensembles estatísticos. A evolução nesses sistemas ocorre de forma lenta, em estados quasi-estacionários, onde o tempo de relaxação para o equilíbrio diverge com o número de partículas. Utilizando de simulações de dinâmica molecular, estudamos no limite termodinâmico a dinâmica de um sistema formado por partículas confinadas a um poço infinito, interagindo por um potencial de Yukawa repulsivo. A prescrição de Kac, feita na forma de uma reescala nas cargas das partículas, possibilitou observar um comportamento característico de sistemas de longo-alcance para o potencial que é originalmente de curto-alcance. A dinâmica dos diversos sistemas simulados — de fato, foram quinze variações do sistema original — resultaram nas mesmas medidas de evolução para as energias do sistema; para a variância nas velocidades das partículas; e para a formação de estruturas no espaço de fase. Considerando esses resultados, é de se supor que a reescala utilizada está correta e a dinâmica do sistema no limite termodinâmico é governada pela equação de Vlasov.

**Palavras-chave:** Interações de longo-alcance, estados quasi-estacionários, potencial de Yukawa, equação de Vlasov.

# Abstract

FARIAS, C. A. F. **Study of the Yukawa potential in the thermodynamic limit and relaxation to quasi-stationary states**

Systems with long-range interactions have different dynamics than those with short-range and, in the thermodynamic limit, they do not always present ergodicity or equivalence of ensembles. The evolution in these systems occurs slowly, in quasi-stationary states, where the relaxation time for equilibrium diverges with the number of particles. Using molecular dynamics simulations, we study the dynamics in the thermodynamic limit of a system formed by particles confined to an infinite well interacting through a repulsive Yukawa potential. The Kac prescription, performed as a re-scaling in the charge of the particles, made it possible to observe a behavior characteristic of long-range systems for the potential that is originally short-range. The dynamics of the various simulated systems — indeed, fifteen variations of the original system were made — resulted in the same measures of evolution for the energies of the system; for the particle velocity variance; and for the formation of structures in the phase space. Given the results, it is assumed that the re-scaling used is correct and the dynamics of the system at the thermodynamic limit is governed by the Vlasov equation.

**Keywords:** Long-range interactions, quasi-stationary states, Yukawa potential, Vlasov equation.

# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>7</b>
1.1	Sistemas com interação de longo-alcance	7
1.2	Motivação	8
<b>2</b>	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>10</b>
2.1	Extensividade e aditividade	10
2.2	Equilíbrio termodinâmico	10
2.3	Equação de Vlasov	12
2.3.1	Estatística de Lynden-Bell	12
2.4	Condição virial	13
<b>3</b>	<b>MODELO DE YUKAWA</b>	<b>14</b>
3.1	Prescrição de Kac	14
3.2	Dinâmica molecular	15
3.2.1	Valores esperados para as energias por partícula	16
3.3	Número virial	17
3.3.1	Evolução do número virial sob diferentes parâmetros	17
3.4	Curtose	18
3.4.1	Evolução da curtose sob diferentes parâmetros	19
3.5	Relaxação para o QSS	20
3.5.1	Formação de clusters	20
3.5.2	Evolução no espaço de fase para diferentes parâmetros	21
<b>4</b>	<b>CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS</b>	<b>23</b>
	<b>Apêndice A – VALOR ESPERADO PARA A ENERGIA CINÉTICA</b>	<b>25</b>
	<b>Apêndice B – VALOR ESPERADO PARA A ENERGIA POTENCIAL</b>	<b>26</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>27</b>

# 1 Introdução

Mecânica estatística é o ramo da física que estuda sistemas de muitas partículas utilizando a teoria das probabilidades. Apesar de parecer simples, essa abordagem permitiu o estudo de sistemas físicos complexos e criou uma estrutura na qual é possível relacionar propriedades microscópicas de átomos e moléculas a conceitos macroscópicos como temperatura, pressão ou entropia. Utilizando a mecânica hamiltoniana é possível descrever os princípios básicos da mecânica estatística, como segue: dado um sistema físico de  $N$  partículas e  $d$  graus de liberdade, o estado do sistema é completamente descrito por um ponto no espaço de fase, definido como o hiper-espaço de  $2dN$ -dimensões. O conjunto de pontos formado pelos estados acessíveis ao sistema formam um ensemble estatístico. De forma equivalente,  $N$  pontos formados pelas coordenadas generalizadas  $\mathbf{q}_i$  e momenta conjugados  $\mathbf{p}_i$  no hiper-espaço de  $2d$ -dimensões, também descrevem o estado do sistema. A hamiltoniana do sistema, dada pela soma das energias cinética e potencial, é finalmente definida como uma função escalar de  $N$  vetores com  $2d$  componentes no espaço de fase. Para sistemas conservativos a hamiltoniana corresponde a energia do sistema, i.e.,  $\varepsilon = \mathcal{H}(\{\mathbf{q}\}, \{\mathbf{p}\})$ , e no equilíbrio termodinâmico, a probabilidade de encontrar o sistema com uma dada energia  $\varepsilon$  é  $\frac{1}{Q}e^{-\beta\mathcal{H}(\{\mathbf{q}\}, \{\mathbf{p}\})}$ , onde

$$Q = \sum_i^N e^{-\beta\mathcal{H}(\{\mathbf{q}\}, \{\mathbf{p}\})} \quad (1.1)$$

$\beta = \frac{1}{k_B T}$ ,  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura.  $Q$  é a somatória de probabilidades de todos os estados acessíveis e é chamada função de partição [1]. O método descrito acima é o resultado dos avanços feitos sobre o trabalho iniciado por Maxwell, e corroborado por Boltzmann, sobre a dinâmica dos gases. Contudo, sua validade não é garantida para sistemas com interações de longo-alcance (LRI<sup>1</sup>) onde podem ser observadas violações dos postulados da mecânica estatística.

## 1.1 Sistemas com interação de longo-alcance

Sistemas LRI — também chamados não integráveis — são definidos como aqueles onde a energia potencial é dada pela soma do potencial entre pares dos elementos constituintes da forma

$$\psi(\mathbf{r}) \propto r^{-\alpha} \quad (1.2)$$

com  $\alpha \leq d$ , sendo  $d$  a dimensão do espaço ao qual o sistema está inserido. Exemplos de sistemas que interagem por potenciais de longo-alcance são sistemas auto-gravitacionais,

<sup>1</sup> Do inglês *long-range interaction*



de plasmas não neutros, da física atômica e nuclear, entre outros [2]. No equilíbrio termodinâmico, a descrição da mecânica estatística de equilíbrio para esses sistemas pode não ser válida, uma vez que as condições de extensividade e aditividade de sua energia interna não são satisfeitas<sup>2</sup>. A extensividade é necessária para garantir a equivalência entre os ensembles estatísticos e um limite termodinâmico não trivial, enquanto que a aditividade é requerida tanto para a entropia quanto para a energia no equilíbrio termodinâmico [3].

A razão de chamar os potenciais de não integráveis vem do fato de que a energia diverge caso o potencial não decaia rápido o suficiente. Observa-se o caso de um sistema genérico no limite termodinâmico: seja a energia de uma partícula dada por  $\varepsilon = \int_V \rho(r)\psi(r)d^d r$ , onde  $d$  é a dimensão e  $V$  o volume ao qual o sistema está confinado. Se  $\rho(r)$  é homogênea, utilizando 1.2 como  $\psi(r)$ , obtém-se

$$\varepsilon \propto \Omega_d \int_{\delta}^R r^{d-1-\alpha} dr = \frac{\Omega_d}{d-\alpha} (R^{d-\alpha} - \delta^{d-\alpha}) \quad (1.3)$$

onde,  $\delta$  é um raio muito pequeno que delimita a vizinhança onde é dito não haver contribuições significativas para a energia,  $\Omega_d$  é o resultado da integral sobre a parte angular e constante (e.g.,  $\Omega_d = 4\pi$  para  $d = 3$ ). Ou seja, a menos de uma constante, a energia  $\varepsilon$  é dada pela equação 1.3. Nota-se que ao levar o sistema para o limite termodinâmico ( $V \propto R^d \rightarrow \infty$ ), a energia diverge caso  $\alpha \leq d$  — que é a condição estabelecida para sistemas LRI. Nesses casos a energia da partícula escala com  $V^{1-\frac{\alpha}{d}}$  e a energia total escala super linearmente com  $V$ ,  $U \propto V^{2-\frac{\alpha}{d}}$ .

## 1.2 Motivação

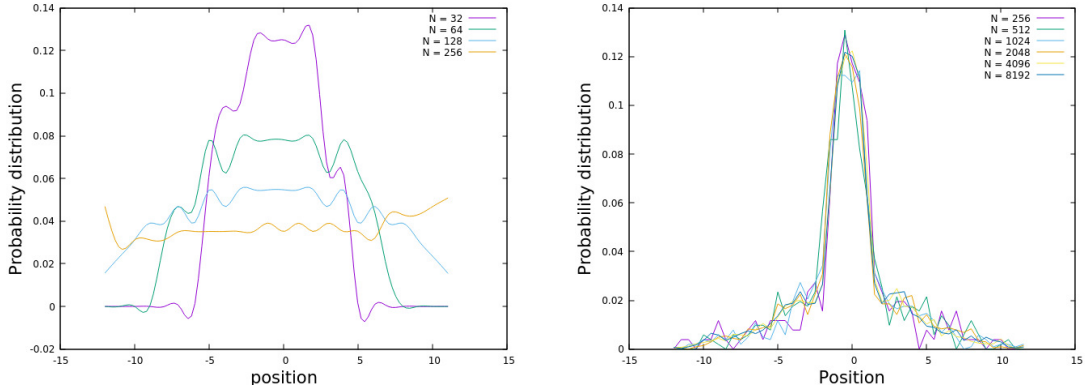
O potencial de Yukawa tem um papel importante no estudo de diversos campos. De acordo com Girotto *et. al.*

The Yukawa potential is used to model interparticle interactions in plasmas, dusty plasmas, colloidal suspensions, and atomic physics. (...) Because of its great importance for various models, the thermodynamics of Yukawa systems has been a subject of extensive study [4].

No entanto, sob certas condições, a correlação entre as partículas pode se tornar forte o suficiente (e.g., baixas temperaturas) para que a distribuição de densidades  $\rho_N(q)$  não seja bem definida no limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ). Isso porque a soma das interações entre os pares de partículas cresce com  $N$  muito mais rapidamente do que o potencial confinante. Pretende-se mostrar que uma reescala na carga  $c$  das partículas, tal que a carga total  $C$  permaneça constante, isto é,  $C = cN$ , permite levar o sistema ao limite termodinâmico. Quando a reescala é feita, as interações entre partículas se tornam infinitesimais e as

<sup>2</sup> Há exceções à regra e existem sistemas LRI que satisfazem às condições de extensividade

infinitas contribuições formam um campo médio. De forma similar a sistemas de longo-alcance (e.g., sistemas gravitacionais, onde  $M = mN$ ), a dinâmica é governada pela equação de Vlasov e o sistema não atinge o equilíbrio termodinâmico, permanecendo preso em estados quasi-estacionários (QSS<sup>3</sup>) por períodos que divergem com  $N$  [5].



- (a) Distribuição de densidades para um sistema sem a prescrição de Kac no SS (valor da curtose igual a três). Os parâmetros do sistema são:  $\alpha = 1$ ;  $q_M = 1$ ; e  $R_0 = 0$ . O tempo de simulação é  $t = 200$ .
- (b) Distribuição de densidades para um sistema com a prescrição de Kac no QSS (curtose estável e um único cluster). Os parâmetros do sistema são:  $\alpha = 1$ ;  $q_M = 8$ ; e  $R_0 = 0$ . O tempo de simulação é  $t = 5000$ .

Figura 1 – Distribuições de densidades no SS (a) e QSS (b). O sistema no qual a prescrição de Kac foi aplicada possui um limite bem definido para  $\rho_N$ . As curvas foram normalizadas apenas para  $N$ .

<sup>3</sup> Do inglês *quasi-stationary state*

## 2 Revisão bibliográfica

### 2.1 Extensividade e aditividade

Um sistema com  $N$  partículas confinadas a um volume  $V$  é dito ser extensivo se, ao escalar ambos por  $\lambda$ , sua energia interna  $U(\lambda N, \lambda V)$  escala também por  $\lambda U(N, V)$ . Para sistemas LRI, é fácil perceber que a correlação entre as partículas é forte e o potencial escala com  $N^2$ . No ensemble canônico, o termo de entropia na energia livre de Helmholtz (2.1) se torna desprezível frente ao termo de energia, uma vez que a entropia de Boltzmann é dada por  $S = k_B \ln(\Omega)$ , e  $\Omega$ , o número de estados acessíveis ao sistema, cresce exponencialmente com  $N$ . Portanto,  $S \propto N$  enquanto  $U \propto N^2$ .

$$F(T, V, N) = U - TS \quad (2.1)$$

A temperatura  $T$  supõe-se ser compatível com valores comumente observados na natureza (e.g., valor constante devido a um banho térmico) e não escalar com o número de partículas. Assim sendo, no equilíbrio termodinâmico, o mínimo da energia livre de Helmholtz será dada apenas pelo mínimo da energia interna, isto é, um limite termodinâmico trivial. Todavia, existem sistemas físicos reais para os quais a temperatura atinge ordens de grandeza suficientemente grandes para tornar o termo entrópico relevante. A fim de estudar estes casos, é possível restaurar a extensividade através da prescrição de Kac [6], redimensionando a energia para magnitudes comparáveis ao termo de entropia. Sobre a não-aditividade, porém, não há o que fazer. A forte correlação entre as partículas não permite desprezar a energia de interface ao adicionar a energia de dois subsistemas A e B, de forma que o sistema formado por A + B possui uma energia  $U_{A+B} \neq U_A + U_B$ , implicando que a não-aditividade é uma característica de sistemas LRI. Os efeitos da não-extensividade e não-aditividade sobre a mecânica estatística de equilíbrio são: a quebra de ergodicidade, a não equivalência de ensembles, calores específicos negativos, e outros [5].

### 2.2 Equilíbrio termodinâmico

A relaxação para o equilíbrio termodinâmico em sistemas de  $N$ -corpos foi primeiramente explicada por Boltzmann. Fundamentada na teoria cinética dos gases, a proposta formulava a relaxação para o equilíbrio através das colisões entre pares das partículas constituintes do sistema. Com sucesso, o modelo explicou como as moléculas de um gás interagindo por forças de curto alcance relaxam para o equilíbrio, corroborando assim os resultados obtidos por Maxwell. Por isso, a distribuição de velocidades no equilíbrio termodinâmico ficou conhecida como distribuição de Maxwell-Boltzmann (MB). Para

sistemas LRI, a relaxação para o equilíbrio é fundamentalmente diferente: o termo colisional (na equação de Boltzmann) é proporcional a  $\frac{1}{N}$  e no limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ), a dinâmica é governada por um campo médio e as colisões se tornam desprezíveis, o tempo de relaxação se torna proporcional ao número de partículas  $N$  e o sistema fica preso em estados fora do equilíbrio chamados estados quasi-estacionários (QSS). O desenvolvimento exibido a seguir representa um dos esforços feitos na tentativa de obter um resultado semelhante ao da distribuição de MB para sistemas LRI.

A evolução temporal do sistema é completamente descrita pelas equações de movimento (EOM<sup>1</sup>) da hamiltoniana e as condições iniciais num tempo  $t_0$ .

$$\dot{\mathbf{q}}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}_i} \quad (2.2a)$$

$$\dot{\mathbf{p}}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}_i} \quad (2.2b)$$

Alternadamente, define-se uma função densidade  $\rho(\mathbf{Q}, \mathbf{P}; t)$  no espaço de  $2dN$ -dimensões,  $\mathbf{Q}$  e  $\mathbf{P}$  sendo os vetores de  $Nd$ -dimensões compostos pelos  $N$  vetores  $d$ -dimensionais  $\mathbf{q}$  e  $\mathbf{p}$ , tal que o número de partículas fica definido como

$$N = \int \dots \int \rho(\mathbf{Q}, \mathbf{P}; t) dq_1 dq_2 \dots dq_N dp_1 dp_2 \dots dp_N \quad (2.3)$$

e também a função distribuição

$$f(\mathbf{Q}, \mathbf{P}; t) = \frac{1}{N} \rho(\mathbf{Q}, \mathbf{P}; t) \quad (2.4)$$

que representa a probabilidade de localizar o sistema no volume infinitesimal  $d\mathbf{Q}d\mathbf{P}$  localizada no hiper-espaço de  $2dN$ -dimensões (i.e.: no espaço de fase). Por sua vez, a dinâmica de  $f(\mathbf{Q}, \mathbf{P}; t)$  no espaço de fase é governada pela equação de Liouville [7]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \{f, \mathcal{H}\} = 0 \quad (2.5)$$

onde,  $\{f, \mathcal{H}\}$  é o parênteses de Poisson, definido como  $\sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial Q_i} \frac{\partial f}{\partial P_i} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial P_i} \frac{\partial f}{\partial Q_i} \right)$ ,  $\mathcal{H}$  a hamiltoniana, e os argumentos  $\mathbf{Q}, \mathbf{P}, \{\mathbf{q}\}, \{\mathbf{p}\}$  e  $t$  das funções foram suprimidos. Apesar de ambos os modelos descreverem a evolução temporal, é mais conveniente definir distribuições reduzidas  $f_1, f_2, \dots, f_N$ , isto é, de partícula única, de duas partículas, e assim por diante, do que trabalhar com a distribuição de pontos de  $f(\mathbf{Q}, \mathbf{P}; t)$  no espaço de fase. Utilizando as equações 2.2, 2.5 e a hierarquia BBGKY, obtém-se uma série de equações acopladas de  $f_1$  e  $f_2$  até  $f_N$ . O resultado para a função distribuição de partícula única é [8, capítulo 15]

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_1} \right) f_1(\mathbf{z}_1) = - \int d\mathbf{z}_2 \left( K_{1,2} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \right) f_2(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2; t) \quad (2.6)$$

onde,  $\mathbf{z}_i \equiv (\mathbf{q}_i, \mathbf{p}_i)$ ,  $d\mathbf{z}_i \equiv d\mathbf{q}_i d\mathbf{p}_i$ ,  $K_{1,2} \equiv -\partial v(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)/\partial \mathbf{q}_1$  e  $v$  é um potencial esfericamente simétrico de interação entre pares. Quando supõe-se a fatoração  $f_2(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2; t) = f_1(\mathbf{z}_1; t)f_1(\mathbf{z}_2; t)$  o termo colisional se torna proporcional a  $\frac{1}{N}$  e no limite termodinâmico a equação 2.6 resulta na equação de Vlasov.

<sup>1</sup> Do inglês *equation of motion*

## 2.3 Equação de Vlasov

No limite termodinâmico, a prescrição de Kac faz com que a correlação entre as partículas se torne zero. A dinâmica é então, governada pela equação de Boltzmann não-colisional, chamada equação de Vlasov.

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial \bar{u}}{\partial \mathbf{q}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) f(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t) = 0 \quad (2.7)$$

onde  $f(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t)$  é a função distribuição de partícula única (e doravante será sempre referenciada como  $f$  ao invés de  $f_1$ ) e  $\bar{u}$  um potencial médio (ou efetivo). A forma que a equação é escrita implica que qualquer função que seja uma constante de movimento em uma órbita  $\Gamma_i = \Gamma_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t)$  no espaço de fase é uma solução da equação de Vlasov. Ademais, quaisquer funcionais da função distribuição são quantidades conservadas, chamadas Invariantes de Casimir

$$C_s[f] = \int d\mathbf{q}d\mathbf{p} a[f(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t)] \quad (2.8)$$

$a[f(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t)]$  é um funcional qualquer de  $f$ . Assim, diferentemente da equação de Boltzmann que possui como solução a distribuição de MB, a equação de Vlasov possui infinitas soluções. Em particular, a entropia de Boltzmann é uma das quantidades conservadas. Dada por  $\int f \ln(f) d\mathbf{q}d\mathbf{p}$ , a entropia de Boltzmann permanece constante no limite termodinâmico e o sistema só evolui para um estado estacionário no conceito desenvolvido por Lynden-Bell.

### 2.3.1 Estatística de Lynden-Bell

Governada pela equação de Vlasov, a função distribuição evolui temporalmente mantendo tanto o volume no espaço de fase quanto a entropia de Boltzmann constantes. De acordo com Lynden-Bell, a evolução ocorre em escalas cada vez menores, e ao supôr macrocélulas de dimensões finitas, dado tempo suficiente, o sistema atingirá um estado estacionário aparente (já que a dinâmica continuará nas microcélulas em escalas microscópicas não observáveis). Utilizando este modelo de granulação (porque divide o espaço de fase em células grossas e finas<sup>2</sup>, Lynden-Bell propôs que pequenas variações nas velocidades e posições das partículas não teriam um papel importante na determinação do comportamento macroscópico do sistema, e definiu uma função distribuição macroscópica  $\tilde{f}$  como uma média de  $f$  sobre uma macrocélula  $d\mathbf{q}d\mathbf{p}$ . Nesse caso, a entropia evolui temporalmente apenas no sentido *coarse-grained* e a função distribuição  $\tilde{f}$  atinge um estado final que depende apenas da distribuição inicial [9].

<sup>2</sup> Em inglês, respectivamente *coarse-grained* e *fine-grained*

## 2.4 Condição virial

Da seção 2.2 sabe-se que o tempo de relaxação para estados estacionários (SS<sup>3</sup>) diverge com o número de partículas. Por outro lado, no SS o sistema deve obedecer ao teorema de virial. O virial  $I$  é dado por

$$I = \left\langle \sum_{i=1}^N \mathbf{q}_i \mathbf{p}_i \right\rangle \quad (2.9)$$

onde  $\langle \circ \rangle$  é a média temporal. No SS  $\frac{dI}{dt} = 0$ , então

$$\frac{dI}{dt} = \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{m_i} \right\rangle - \left\langle \sum_{i=1}^N \mathbf{q}_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}_i} \right\rangle = 0 \quad (2.10)$$

onde foi utilizada a relação 2.2b para  $\dot{p}$ . Agora, seja a hamiltoniana genérica dada por

$$\mathcal{H}(\{\mathbf{q}\}, \{\mathbf{p}\}) = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N V(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|) + \frac{\kappa}{2} \sum_{i=1}^N |\mathbf{q}_i|^\gamma \quad (2.11)$$

$\mathbf{q}_i$  e  $\mathbf{p}_i$  são, respectivamente, as coordenadas generalizadas e momenta conjugados;  $V(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|)$  é um potencial de interação entre pares de partículas; e  $\sum_{i=1}^N |\mathbf{q}_i|^\gamma$  é um potencial confinante. A condição virial dada pelas equações 2.10 e 2.11 é tal que

$$\frac{dI}{dt} = \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{m_i} \right\rangle - \left\langle \sum_{i=1}^N \mathbf{q}_i \left( \frac{\partial \tilde{V}}{\partial \mathbf{q}_i} + \frac{\gamma \kappa}{2} |\mathbf{q}_i|^{\gamma-1} \right) \right\rangle = 0 \quad (2.12)$$

$$2T - \tilde{U} = 0 \quad (2.13)$$

onde  $\tilde{V} = \frac{1}{2} \sum_{i,j}^N V(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|)$  é o potencial entre pares de partículas,  $T = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} \right\rangle$  é a energia cinética média por partícula, e  $\tilde{U} = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i^N \mathbf{q}_i \frac{\partial \tilde{V}}{\partial \mathbf{q}_i} \right\rangle + \frac{1}{N} \left\langle \frac{\gamma \kappa}{2} \sum_i^N |\mathbf{q}_i|^\gamma \right\rangle$  é uma quantidade que, se  $\tilde{V}$  for uma função homogênea, está relacionada à energia potencial média do sistema.

---

<sup>3</sup> Do inglês *stationary state*

### 3 Modelo de Yukawa

O potencial de Yukawa foi desenvolvido para aplicações em física de partículas e atômica, em especial para tratar de potenciais coulombianos com blindagem, e é o resultado da seguinte equação, conhecida como equação de Yukawa [10]

$$\Delta\psi = \mu^2\psi \quad (3.1)$$

com  $\Delta$  sendo o operador Laplaciano, e  $\mu \in \mathbb{R}$  e constante. Em uma dimensão e, com a condição de contorno de que  $\psi(\infty) = 0$ , a solução é  $\psi(x) = ce^{-\mu x}$ .

Seja o sistema 1-dimensional formado por N partículas interagentes através de uma variação do potencial de Yukawa, confinadas a um potencial quadrático. A hamiltoniana é dada por

$$\mathcal{H}(\{q\}, \{p\}) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \psi(q_i, q_j) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \alpha q_i^2 \quad (3.2)$$

$$\psi(q_i, q_j) = \frac{1}{\mu} c_i c_j e^{-\mu|q_i - q_j|} \quad (3.3)$$

$\frac{1}{2}\alpha q^2$  é o potencial confinante; enquanto  $\psi(q_i, q_j)$  é o potencial repulsivo entre os pares de partículas;  $c_i$  é uma constante que representa a carga das partículas. A equação 3.2, porém, não representa um sistema LRI e são necessários alguns redimensionamentos.

#### 3.1 Prescrição de Kac

Como foi discutido nas seções iniciais, para restaurar a extensividade do sistema é necessário aplicar a prescrição de Kac. Fazendo a substituição de variáveis  $c_i = c_j = c$ ,  $m_i = m = 1$ ,  $\tilde{q}_i = \mu q_i$ ,  $\tilde{p}_i = p_i \sqrt{\mu}$ ,  $\tilde{\alpha} = \frac{\alpha}{\mu}$ ,  $\tilde{\mathcal{H}} = \mu \mathcal{H}$  obtém-se

$$\tilde{\mathcal{H}}(\{q\}, \{p\}) = \sum_{i=1}^N \frac{\tilde{p}_i^2}{2} + \frac{c^2}{2} \sum_{i,j=1}^N e^{-|\tilde{q}_i - \tilde{q}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \tilde{\alpha} \tilde{q}_i^2 \quad (3.4)$$

A fim de obter um limite termodinâmico bem definido para as partículas confinadas, as cargas das partículas devem ser reescaladas com N de forma semelhante à prescrição de Kac para sistemas de longo-alcance. Sendo assim, na medida em que  $N \rightarrow \infty$ , a correlação entre as partícula enfraquece e a dinâmica do sistema passa a ser governada pela equação de Vlasov. Ao abandonar a notação com  $\sim$  e fazer com que  $c \equiv \frac{1}{\sqrt{N}}$ , têm-se que

$$\mathcal{H}(\{q\}, \{p\}) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^N e^{-|q_i - q_j|} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \alpha q_i^2 \quad (3.5)$$

O termo de  $\frac{1}{N}$  deve fazer com que, no limite termodinâmico, o caráter da dinâmica seja similar ao de sistemas LRI.

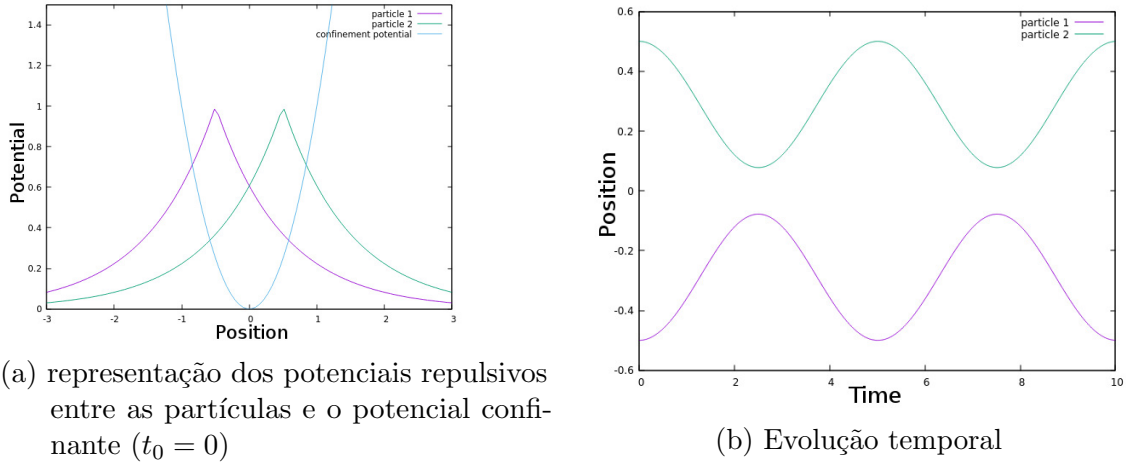


Figura 2 – Dinâmica do sistema descrito pela hamiltoniana 3.5 para  $N = 2$ ;  $q_1(t_0) = -0.5$ ; e  $q_2(t_0) = 0.5$ . Nota-se que as partículas caem para o centro devido ao potencial confinante, mas à medida que se aproximam, a força de repulsão entre elas aumenta e elas tornam a se afastar.

## 3.2 Dinâmica molecular

A evolução temporal da hamiltoniana 3.5 foi simulada utilizando dinâmica molecular (MD<sup>1</sup>) com um integrador simplético de 4<sup>a</sup> ordem [11]. Os dados produzidos representam variações dos parâmetros, tais como a energia cinética ou o tamanho da região na qual as partículas foram confinadas. A distribuição de partículas utilizada é conhecida como water-bag (WB), e é dada por

$$f(q, p) = \eta \Theta(q_M - |q|) \Theta(p_M - |p|) \quad (3.6)$$

onde,  $\Theta$  é a função Heaviside,  $q_M$  e  $p_M$  são os valores máximos para as coordenadas generalizadas e momenta conjugados e  $\eta = \frac{1}{4q_M p_M}$  é uma constante de normalização, tal que  $\int f(q, p) dq dp = 1$ .

Para fins de simulação, o sistema deve poder iniciar em condições próximas as do SS. Portanto, as energias esperadas da distribuição WB foram calculadas analiticamente de forma que satisfaçam o teorema do virial. Também, um fator constante A foi adicionado ao potencial para acelerar a dinâmica<sup>2</sup>, uma vez que ele aumenta a força de interação entre as partículas. Os códigos utilizados nas simulações podem ser acessados em [12].

<sup>1</sup> Do inglês *molecular dynamics*

<sup>2</sup> Apesar de o fator acelerar a dinâmica, ele não pode ser considerado uma reescala temporal, uma vez que o termo do potencial confinante não é afetado



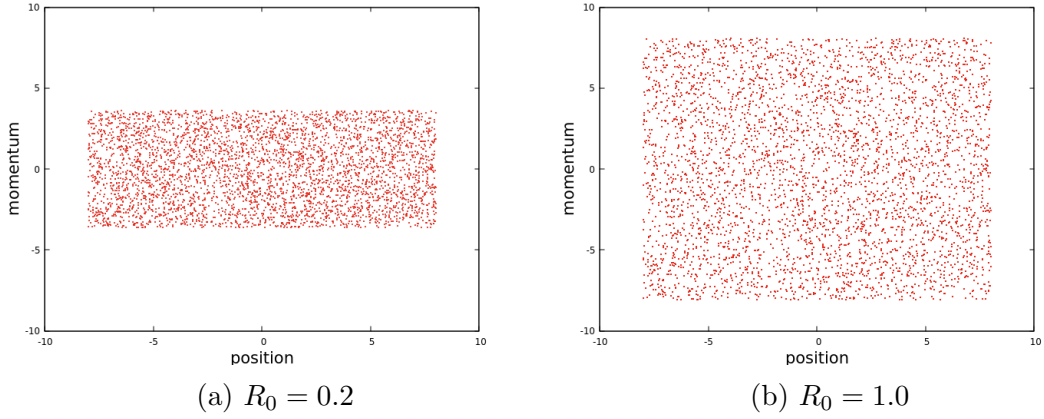


Figura 3 – Espaço de fase para duas distribuições de partícula única. Os parâmetros são:  $N = 4096$ ;  $q_M = 8$ ; e diferentes valores de  $p_M$  definidos pelo número virial  $R_0$ .

### 3.2.1 Valores esperados para as energias por partícula

Utilizando as equações 2.12 e 3.5 e, sabendo que  $\frac{\partial \psi}{\partial q_i} = \sum_{j \neq i}^N \frac{q_j - q_i}{|q_j - q_i|} A e^{-|q_i - q_j|}$ , estabelece-se que a energia cinética no SS deve ser tal que

$$\frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N p_i^2 \right\rangle = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N \left( q \frac{\partial \psi}{\partial q_i} + \alpha |q_i|^2 \right) \right\rangle \quad (3.7)$$

onde  $\frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N p_i^2 \right\rangle = 2T$ . Utilizando a função distribuição sobre a região espacial, isto é,  $\eta_0(q) = \int f(q, p; t) dp = (2q_M)^{-1} \Theta(q_M - |q|)$ , faz-se  $\sum \rightarrow \int$

$$T = \frac{A}{2} \int \int q \frac{q' - q}{|q' - q|} e^{-|q - q'|} \eta_0(q') dq' \eta_0(q) dq + \frac{\alpha}{2} \int q^2 \eta_0(q) dq \quad (3.8)$$

onde  $T$  é a energia cinética media esperada no SS. O desenvolvimento da integral está apresentado no apêndice A. Seu resultado é

$$T = \frac{A}{q_M^2} (q_M \cosh(q_M) - \sinh(q_M)) e^{-q_M} + \alpha \frac{q_M^2}{6} \quad (3.9)$$

De outra forma, é possível calcular a energia cinética esperada da distribuição utilizando o termo cinético  $\frac{p^2}{2}$ . Para isso, calcula-se a integral sobre a região à qual o sistema está confinado, levando em consideração a função distribuição (water-bag). No SS, espera-se que 3.10 seja igual a 3.9.

$$T = \int \frac{p^2}{2} f(q, p; t) dp dq = \frac{1}{4p_M q_M} \int_{-q_M}^{q_M} \int_{-p_M}^{p_M} \frac{p^2}{2} dq dp = \frac{p_M^2}{6} \quad (3.10)$$

Para a energia potencial, o cálculo é semelhante ao da energia cinética. O desenvolvimento está apresentado no apêndice B.

$$U = \frac{A}{2} \int \int e^{-|q - q'|} \eta_0(q) \eta_0(q') dq' dq + \frac{\alpha}{2} \int q^2 \eta_0(q) dq \quad (3.11)$$

$$U = \frac{A}{2q_M^2} (q_M - \sinh(q_M) e^{-q_M}) + \alpha \frac{q_M^2}{6} \quad (3.12)$$

### 3.3 Número virial

Define-se o número virial a partir da equação 2.13 como  $R_0 \equiv 2T/\tilde{U}$ , tal que, quando  $R_0 = 1$  a proporção entre as energias cinética e potencial será a de um SS. Da hamiltoniana 3.5 deduz-se que

$$T = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2} \right\rangle \quad (3.13a)$$

$$\tilde{U} = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N q_i \frac{A}{N} \sum_{j \neq i}^N \frac{q_j - q_i}{|q_j - q_i|} e^{-|q_i - q_j|} \right\rangle + \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N \alpha q_i^2 \right\rangle \quad (3.13b)$$

A dinâmica do sistema depende fortemente do número virial. Se  $R_0 = 1$ , então a dinâmica ocorre num estado similar ao de um SS e é estável, no sentido de que a variação da distribuição de velocidades e posições das partículas é pequena. Por outro lado, se  $R_0$  difere do valor unitário surgem oscilações nas energias e na variância da distribuição de velocidades das partículas.

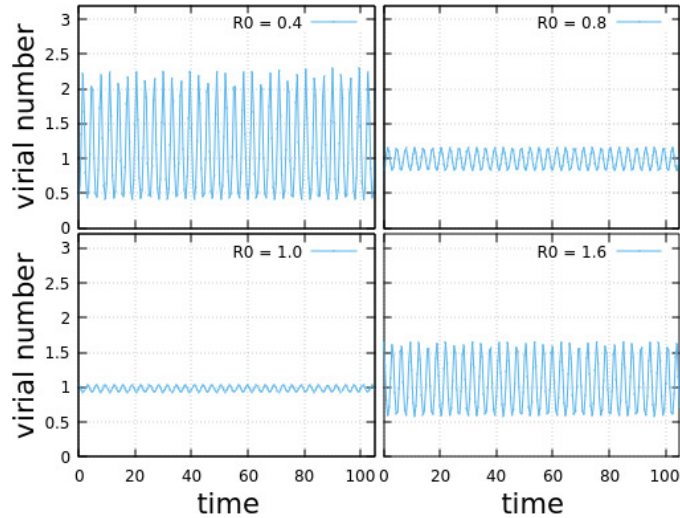


Figura 4 – Evolução do número virial para diferentes distribuições WB. O sistema com  $R_0 = 1.0$  satisfaz ao teorema do virial e apresenta pequenas oscilações se comparado aos sistemas que não o satisfazem. A evolução foi calculada utilizando as equações 3.13 com:  $N = 4096$ ;  $\alpha = 1$ ; e  $q_M = 8$ .

#### 3.3.1 Evolução do número virial sob diferentes parâmetros

Esta subseção apresenta o resultado de diferentes parâmetros no modelo de Yukawa para a evolução do número virial. Como esperado de sistemas LRI, a dinâmica foi extremamente similar para as diferentes condições testadas.

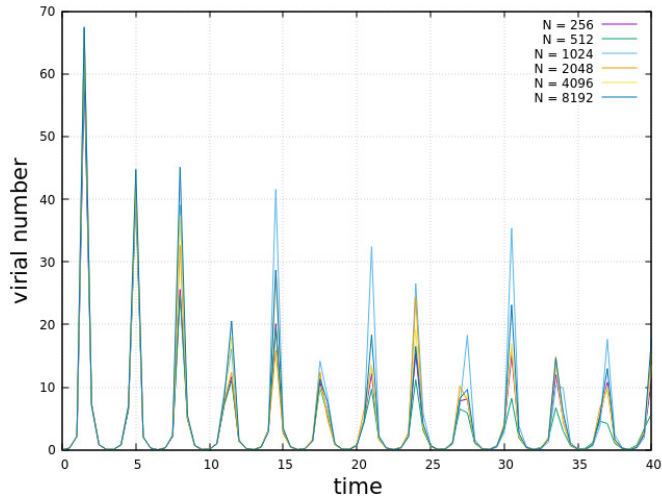


Figura 5 – Medida do número virial para diferentes valores do número de partículas. A evolução da dinâmica é extremamente semelhante apesar da grande diferença entre os valores de  $N$ . Os outros parâmetros são  $R_0 = 0$ ,  $\alpha = 1$  e  $q_M = 8$ .

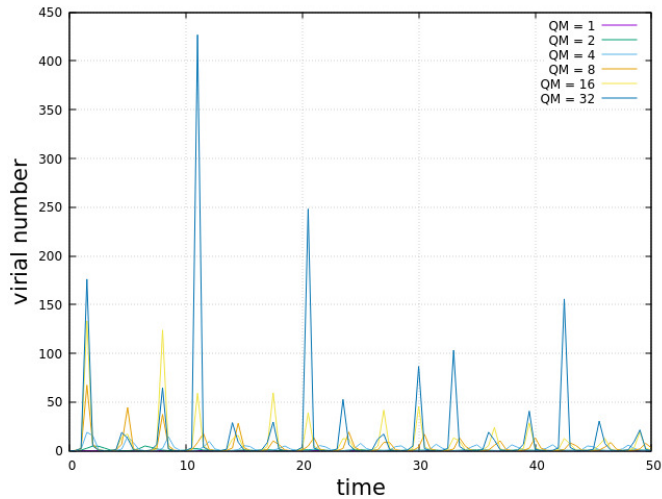


Figura 6 – Medida do número virial para diferentes tamanhos do sistema. QM representa o limite  $q_M$  na distribuição WB. Os outros parâmetros são  $R_0 = 0$ ,  $\alpha = 1$  e  $N = 4096$ .

### 3.4 Curtose

A curtose é uma medida da forma da distribuição de probabilidades, definida como a razão entre o quarto momento central e o segundo momento central ao quadrado.

$$kurt[p] = \frac{\mu_4}{\mu_2^2} \quad (3.14)$$

A distribuição normal é tomada como referência e possui curtose igual a três. Distribuições que possuem curtose igual ou próxima da distribuição normal são chamadas mesocúrticas. Valores maiores de curtose indica que a distribuição possui uma variância alta e são chamadas leptocúrticas, enquanto valores menores de curtose indicam uma distribuição mais compacta (no sentido de que a variância é baixa) e são chamadas platicúrticas.

### 3.4.1 Evolução da curtose sob diferentes parâmetros

Esta subsecção apresenta o resultado de diferentes parâmetros no modelo de Yukawa para a evolução da curtose (calculada sobre o momentum das partículas).

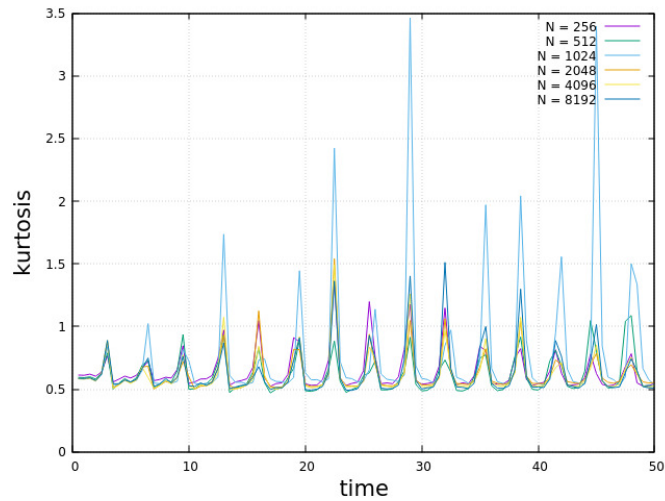


Figura 7 – Medida da curtose para diferentes valores do número de partículas. Como à exemplo do número virial, a semelhança entre as diferentes curvas é clara. Os outros parâmetros são  $R_0 = 0$ ,  $\alpha = 1$  e  $q_M = 8$ .

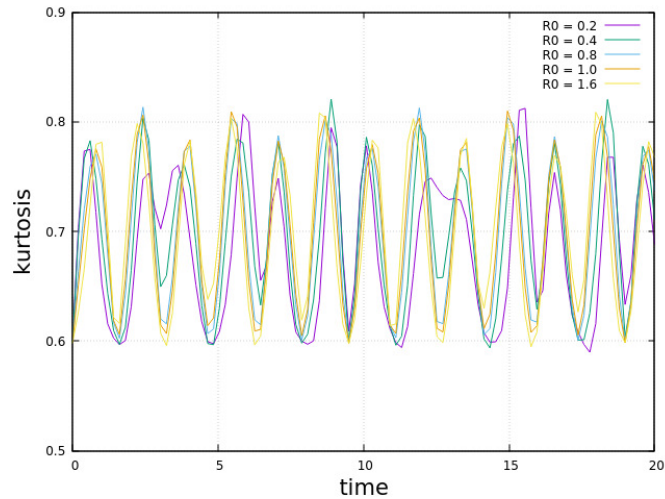


Figura 8 – Medida da curtose para diferentes valores da energia cinética (ou do número virial  $R_0$ ). Os outros parâmetros são  $N = 4096$ ,  $\alpha = 1$  e  $q_M = 8$ .

### 3.5 Relaxação para o QSS

Em sistemas LRI, a relaxação é um dos processos mais imprevisíveis quando comparados à dinâmica de sistemas de curto alcance. Como já foi discutido, sistemas LRI ficam presos em QSS's que dependem apenas da função distribuição inicial, durante períodos que divergem com o número de partículas. A dinâmica do modelo de Yukawa estudado neste capítulo permite um estudo do processo de relaxação para o QSS.

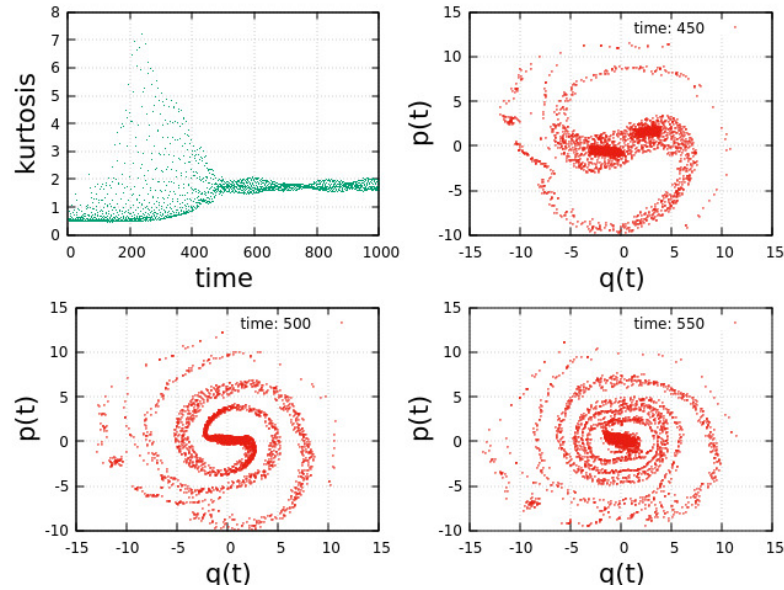


Figura 9 – Curtose e evolução no espaço de fase. Após a curtose estabilizar não observam-se mais formações de clusters. A partir deste ponto, as partículas irão girar continuamente no espaço de fase, fazendo com que a distribuição ao redor do bojo pareça homogênea.

O autor supõe que para os sistemas do potencial de Yukawa estudados, o QSS é atingido quando a curtose estabiliza, e observa-se apenas um cluster de partículas no espaço de fase. Essa evolução com um número decrescente de clusters, porém, só é observada em sistemas com o parâmetro  $R_0 \sim 0$ , pois para os casos onde  $R_0 \sim 1$  o sistema inicia com as energias de um SS e muito próximo do QSS (conforme figura 11).

#### 3.5.1 Formação de clusters

Para sistemas com  $R_0 = 0$ , nos primeiros momentos da dinâmica ocorre a formação de clusters. O número de clusters formados, e sua combinação em números cada vez menores torna explícita a relação entre os diversos sistemas estudados. Na figura 10 essa relação se torna clara e pode-se afirmar que a dinâmica não depende de parâmetros como o número de partículas.

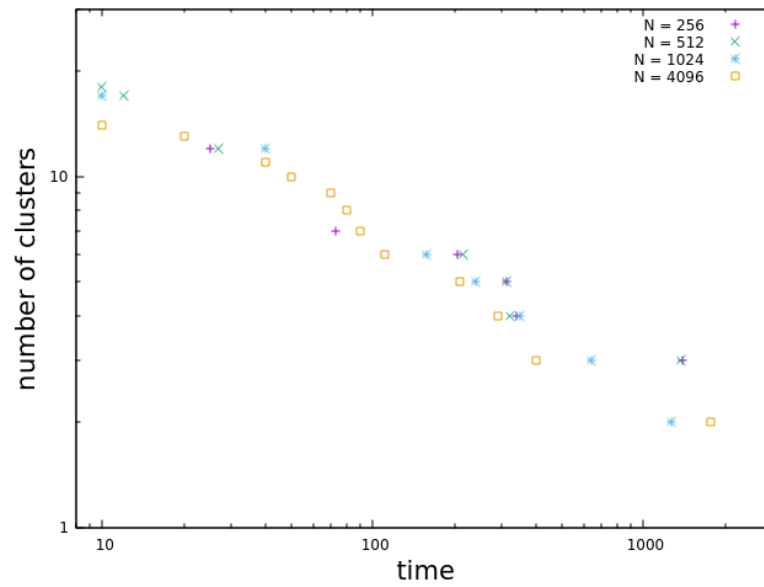


Figura 10 – Número de clusters no espaço de fase vs. o tempo. Os diferentes sistemas apresentam uma alta correlação nos valores do número de clusters observados, apesar da variação no número de partículas.

### 3.5.2 Evolução no espaço de fase para diferentes parâmetros

Esta subsecção é dedicada a alguns exemplos da evolução no espaço de fase para diferentes parâmetros.

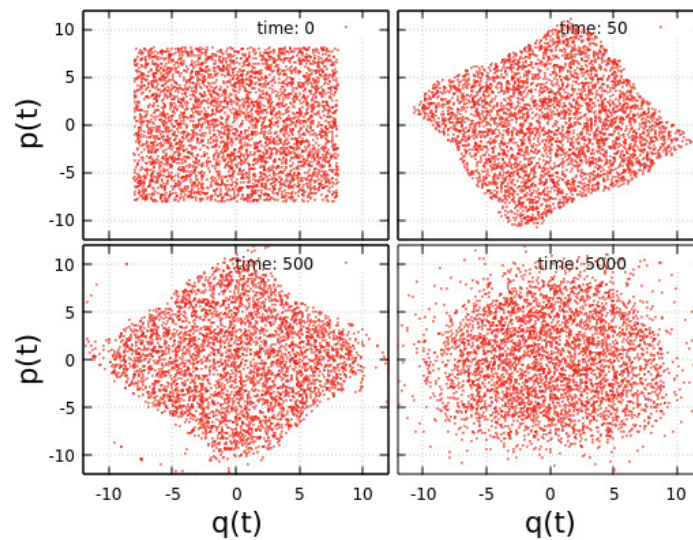


Figura 11 – Evolução temporal do sistema com  $R_0 = 1$ . As partículas giram no espaço de fase com uma velocidade angular diferente e eventualmente formam uma estrutura circular. Os outros parâmetros são  $N = 4096$ ,  $\alpha = 1$  e  $q_M = 8$ .

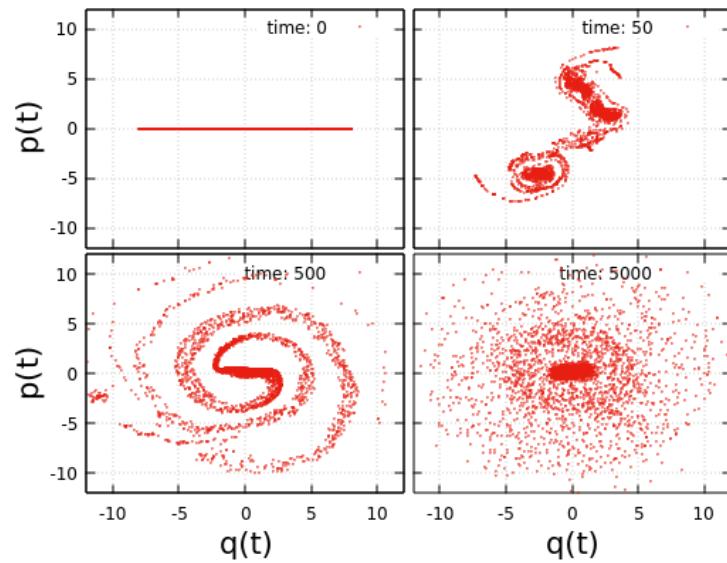


Figura 12 – Evolução temporal do sistema com  $R_0 = 0$ . Após a formação de clusters no início da dinâmica, eles combinam-se até sobrar apenas um e então supõe-se que o sistema tenha atingido o QSS. Os outros parâmetros são os mesmos da figura 11.

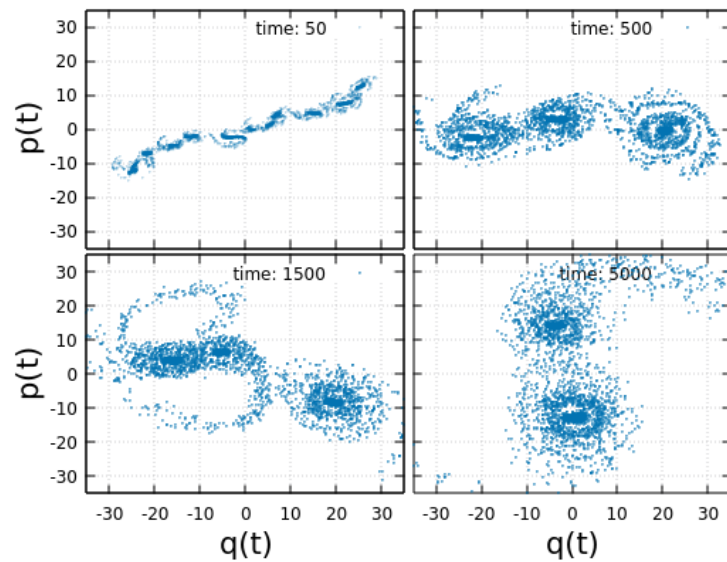


Figura 13 – Evolução temporal do sistema com  $q_M = 32$ . Apesar de aumentar o tamanho do sistema, a dinâmica continua semelhante à observada para sistemas menores. Os outros parâmetros são os mesmos da figura 12.

## 4 Conclusão e perspectivas

Na introdução deste trabalho foi sugerido que uma reescala por um fator de  $N^{-1}$  sobre o potencial de Yukawa levaria o sistema ao limite termodinâmico. Não havia razões suficientes que garantissem que a reescala inversamente proporcional a  $N$  fosse a correta e um fator como  $N^{-\gamma}$ , com  $\gamma \neq 1$  poderia surgir. Porém, os dados de diversas simulações de MD, como apresentados no capítulo 3, corroboraram  $\gamma = 1$ . Os valores de curtose, assim como os do número virial, provaram-se valiosos na medida em que implicaram que a evolução da dinâmica do sistema ocorre de forma extremamente semelhante, mesmo para variações bruscas dos parâmetros, e.g., no número de partículas por um fator de 16, no número virial por um fator de 80 e no tamanho do sistema por um fator de 32. Mas de certa forma, foi a correlação no número de clusters formados em função do tempo que estabeleceu a relação entre os diferentes sistemas simulados e mostrou que o sistema evolui sob a ação de um campo médio, exatamente como é previsto pela equação de Vlasov. Também é válido notar que as diferentes funções densidade de probabilidades  $\rho_N(q, p)$  evoluíram para uma mesma função, de acordo com a figura 1b. Dito isso, os sistemas com  $R_0 = 1$  realmente iniciam direto num QSS, sem apresentar nenhuma característica notável durante sua evolução. Por outro lado, os sistemas com  $R_0 \sim 0$  apresentam uma dinâmica rica nos primeiros momentos da simulação, i.e. antes de convergir para o QSS. O tempo característico de convergência para os QSSs de cada sistema ainda configura uma questão em aberto e, espera-se que em trabalhos futuros possa ser observada uma relação. Um dos caminhos para isso é refazer as simulação com um potencial de Yukawa atrativo, removendo o potencial de confinamento.



# Apêndices

# Apêndice A – Valor esperado para a energia cinética

Partindo da equação 3.8,

$$T = \frac{\alpha}{2} \int q^2 \eta_0(q) dq + \frac{1}{2} \int \int \left( q \frac{\partial}{\partial q} [A e^{-|q-q'|}] \right) \eta_0(q') \eta_0(q) dq' dq \quad (\text{A.1})$$

$$(\text{A.2})$$

e lembrando que,  $\eta_0(q) = (2q_M)^{-1} \Theta(q_M - |q|)$

$$T = \frac{\alpha}{2} \frac{1}{2q_M} \int_{-q_M}^{q_M} q^2 dq + \frac{1}{2} \frac{1}{4q_M^2} \int_{-q_M}^{q_M} \int_{-q_M}^{q_M} q \frac{q' - q}{|q' - q|} A e^{-|q-q'|} dq' dq \quad (\text{A.3})$$

$$T = \alpha \frac{q_M^2}{6} + \frac{A}{8q_M^2} \int_{-q_M}^{q_M} \left( \int_{-q_M}^q q e^{q'-q} dq' - \int_q^{q_M} q e^{q-q'} dq' \right) dq \quad (\text{A.4})$$

$$T = \alpha \frac{q_M^2}{6} + \frac{A}{8q_M^2} \int_{-q_M}^{q_M} q (1 - e^{-q-q_M} + e^{-q_M+q} - 1) dq \quad (\text{A.5})$$

$$T = \alpha \frac{q_M^2}{6} + \frac{A}{8q_M^2} \int_{-q_M}^{q_M} q (-e^{-q-q_M} + e^{-q_M+q}) dq \quad (\text{A.6})$$

$$T = \alpha \frac{q_M^2}{6} + \frac{A}{8q_M^2} \int_{-q_M}^{q_M} q 2\sinh(q) e^{-q_M} dq \quad (\text{A.7})$$

$$T = \alpha \frac{q_M^2}{6} + \frac{A}{4q_M^2} (2q_M \cosh(q) - 2\sinh(q)) e^{-q_M} \quad (\text{A.8})$$

$$T = \alpha \frac{q_M^2}{6} + \frac{A}{2q_M^2} (q_M \cosh(q) - \sinh(q)) e^{-q_M} \quad (\text{A.9})$$

## Apêndice B – Valor esperado para a energia potencial

Partindo da equação 3.11,

$$U = \frac{\alpha}{2} \int q^2 \eta_0(q) dq + \frac{A}{2} \int \int e^{-|q-q'|} \eta_0(q) \eta_0(q') dq' dq \quad (\text{B.1})$$

$$(\text{B.2})$$

e lembrando que,  $\eta_0(q) = (2q_M)^{-1} \Theta(q_M - |q|)$

$$U = \frac{\alpha}{2} \frac{1}{2q_M} \int_{-q_M}^{q_M} q^2 dq + \frac{A}{2} \frac{1}{4q_M^2} \int_{-q_M}^{q_M} \int_{-q_M}^{q_M} e^{-|q-q'|} dq' dq \quad (\text{B.3})$$

$$U = \alpha \frac{q^2}{6} + \frac{A}{8q_M^2} \int_{-q_M}^{q_M} \left[ \int_{-q_M}^q e^{-q+q'} dq' + \int_q^{q_M} e^{q-q'} dq' \right] dq \quad (\text{B.4})$$

$$U = \alpha \frac{q^2}{6} + \frac{A}{8q_M^2} \int_{-q_M}^{q_M} [1 - e^{-(q+q_M)} - e^{q-q_M} + 1] dq \quad (\text{B.5})$$

$$U = \alpha \frac{q^2}{6} + \frac{A}{8q_M^2} \int_{-q_M}^{q_M} [2 - e^{-q_M} (e^{-q} - e^q)] dq \quad (\text{B.6})$$

$$U = \alpha \frac{q^2}{6} + \frac{A}{8q_M^2} \int_{-q_M}^{q_M} [2 - 2\cosh(q_M) e^{-q_M}] dq \quad (\text{B.7})$$

$$U = \alpha \frac{q^2}{6} + \frac{A}{8q_M^2} (4q_M - 4\sinh(q_M) e^{-q_M}) \quad (\text{B.8})$$

$$U = \alpha \frac{q^2}{6} + \frac{A}{2q_M^2} (q_M - \sinh(q_M) e^{-q_M}) \quad (\text{B.9})$$

# Referências

- [1] R. P. Feynman, *Statistical Mechanics: A Set Of Lectures (Advanced Books Classics)*. Westview Press, 2 ed., 1998. Citado na página 7.
- [2] A. Campa, T. Dauxois, and S. Ruffo, “Statistical mechanics and dynamics of solvable models with long-range interactions,” *Physics Reports*, vol. 480, no. 3–6, pp. 57 – 159, 2009. Citado na página 8.
- [3] A. B. Pippard, *Elements of classical thermodynamics*. Cambridge University Press, 1957. Citado na página 8.
- [4] M. Giroto, A. P. dos Santos, T. Colla, and Y. Levin, “Yukawa particles in a confining potential,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 141, no. 1, 2014. Citado na página 8.
- [5] Y. Levin, R. Pakter, F. B. Rizzato, T. N. Teles, and F. P. Benetti, “Nonequilibrium statistical mechanics of systems with long-range interactions,” *Physics Reports*, vol. 535, no. 1, pp. 1 – 60, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 10.
- [6] M. Kac, “On the partition function of a one dimensional gas,” *Physics of Fluids*, vol. 2, no. 1, pp. 8 – 12, 1959. Citado na página 10.
- [7] L. E. Reichl, *A modern course in statistical physics*. Wiley, 2 ed., 1998. Citado na página 11.
- [8] S. Salinas, *Introdução à Física Estatística*. Edusp, 2nd ed., 2008. Citado na página 11.
- [9] L. Bell, “Statistical mechanics of violent relaxation in stellar systems,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 136, no. 1, pp. 101 – 121, 1967. Citado na página 13.
- [10] R. Duffin, “Yukawan potential theory,” *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, vol. 35, no. 1, pp. 105 – 130, 1971. Citado na página 14.
- [11] H. Yoshida, “Construction of higher order symplectic integrators,” *Physics Letters A*, vol. 150, no. 5, pp. 262 – 268, 1990. Citado na página 15.
- [12] C. A. F. Farias, “Ic2015/2, repositório do github.” <https://github.com/calvinfarias/IC2015-2>. Disponível em Novembro de 2016. Citado na página 15.