



**UNIVERSIDADE
FEDERAL
DE PERNAMBUCO**

Kainã Terto Pereira

**ESTUDO DE MÉTODO DE FRONTEIRA PARA SOLUÇÃO
NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE HELMHOLTZ E APLICAÇÃO A
BILHARES QUÂNTICOS**

Dissertação de Mestrado



Universidade Federal de Pernambuco
Departamento de Física
Programa de Pós graduação

**RECIFE
2018**



Universidade Federal de Pernambuco
Departamento de Física
Programa de Pós graduação em Física

Kainã Terto Pereira

**ESTUDO DE MÉTODO DE FRONTEIRA PARA SOLUÇÃO
NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE HELMHOLTZ E APLICAÇÃO A
BILHARES QUÂNTICOS**

*Trabalho apresentado ao Programa de Pós graduação em
Física do Departamento de Física da Universidade Federal
de Pernambuco como requisito parcial para obtenção do
grau de mestre em Física.*

Orientador: *Flávio Menezes de Aguiar*

RECIFE
2018

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,
através do programa de geração automática do SIB/UFPE

Pereira, Kainã Tertó.

Estudo de método de fronteira para solução numérica da equação de Helmholtz e aplicação a bilhares quânticos / Kainã Tertó Pereira. - Recife, 2018.
61 : il., tab.

Orientador(a): Flávio Menezes de Aguiar

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Pernambuco, Centro de Ciências Exatas e da Natureza, Programa de Pós-Graduação em Física, 2018.
Inclui referências, apêndices.

1. Dinâmica não linear. 2. Caos. 3. Sistemas complexos. I. Aguiar, Flávio Menezes de. (Orientação). II. Título.

530 CDD (22.ed.)

KAINÃ TERTO PEREIRA

**ESTUDO DE MÉTODO DE FRONTEIRA PARA SOLUÇÃO NUMÉRICA DA
EQUAÇÃO DE HELMHOLTZ E APLICAÇÃO A BILHARES QUÂNTICOS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, Centro Acadêmico Recife, como requisito para a obtenção do título de Mestre em Física. Área de concentração: Dinâmica não-linear

Aprovado em: 04/09/2018.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Flávio Menezes de Aguiar (Orientador)
Universidade Federal de Pernambuco - UFPE

Prof. Dr. Marcelo Andrade de Figueiras Gomes
(Examinador Interno)
Universidade Federal de Pernambuco - UFPE

Prof. Dr. Fernando Jorge Sampaio Moraes
(Examinador Externo)
Universidade Federal Rural de Pernambuco - UFRPE

Dedico esse trabalho aos meus pais, Wanda Helena e Wagner, e à minha avó Maria Helena, sem os quais nada disso seria possível.

Agradecimentos

Agradeço profundamente à minha família por todo o suporte prestado não só durante o período conturbado em que me dediquei à execução do presente trabalho. Eles foram de importância fundamental e sem o seu suporte, certamente, não seria possível obter resultado algum. Em especial minha mãe, Wanda Helena, meu pai, Wagner, minha irmã, Tainara, minha avó, Maria Helena, tios, tias e primos.

Aos meus grandes amigos, que nada mais são que mais uma forma de família que carrego, meus mais sinceros agradecimentos. Pela paciência, pela companhia, pela provocação intelectual que foi e espero que continue a ser uma das principais características das nossas interações. Em especial Dener, Caique, Jully, Ramylle, Pedro, José Paulo, André, Luísa, Victor Hugo, Ananda, Natielle, Lohanna, Cecília, Camila, Liêve, Tiago Saraiva, Florentino, Guilherme, Kalynne, Renata. Vocês foram e continuarão a ser uma parte importantíssima na minha vida e provedores de boa parte da energia que me move. Todos vocês contribuíram de maneira direta ou indireta para a execução desse trabalho.

Por toda a presteza em fornecer sempre auxílio, a Ricardo Batista, Raoni Sávio, Tiago Ribeiro, Tiago Araújo e demais companheiros de academia, um agradecimento especial.

Ao professor Flávio Aguiar, todo o agradecimento pela paciência, disposição, suporte e orientação.

Agradeço ainda ao Departamento de Física da UFPE por prover a estrutura necessária para o desenvolvimento do presente trabalho, além do CNPq pelo suporte financeiro.

*... Ser poeta é saber não ser escravo
Da mesmice e do conservadorismo.
Impedir de morrer na guilhotina
O boêmio cantor do iluminismo.
E lutar até ver cair vencida
A esquadra do vil capitalismo.
—ANTÔNIO MARINHO*

Resumo

Em dinâmica clássica, um sistema é classificado como *caótico* quando possui um expoente de Lyapunov positivo. Tal classificação quantitativa, baseada em trajetórias em um espaço de fases, não é possível em dinâmica quântica devido ao Princípio da Incerteza. É natural, então, se esperar que qualquer relação clássico-quântica seja revelada no regime semiclássico, ou seja, em estados altamente excitados de um sistema quântico fechado. Bilhares são modelos protótipos na teoria ergódica de sistemas dinâmicos e sua quantização ganhou interesse elevado nas últimas décadas. O problema quântico corresponde ao de uma partícula confinada em um poço infinito bidimensional com a mesma fronteira. Esta dissertação aborda o problema da solução numérica da equação de Schrödinger independente do tempo, que corresponde à equação de Helmholtz em um domínio planar Ω com condições de contorno de Dirichlet na fronteira Γ . Para isso, elaboramos códigos em C++, com o auxílio da biblioteca descrita em (SANDERSON; CURTIN, 2016) e (SANDERSON; CURTIN, 2018), que utilizam o método de escala introduzido por Vergini e Sarraceno. Tal método permite o cálculo eficiente de centenas de milhares de autovalores e autovetores de energia de um bilhar. Após testes comparativos com resultados exatos, realizamos estudos de propriedades estatísticas dos espectros de alguns bilhares de interesse. Especificamente, investigamos a distribuição de espaçamento entre primeiros vizinhos, a estatística Δ_3 , e a presença de ruído $1/f^\alpha$ em estádios elípticos e triângulos irracionais, obtendo resultados consistentes com previsões da teoria de matrizes aleatórias. Em regimes em que a dinâmica clássica é fortemente *mixing* ou caótica, as estatísticas se aproximam daquela prevista pelo *ensemble* gaussiano ortogonal das matrizes aleatórias na presença de simetria de reversão temporal. Em outro limite, o de sistemas integráveis, as flutuações são do tipo Poisson. Para espaços de fases mistos, observamos estatísticas intermediárias, como esperado. Direcionamentos possíveis para futuros trabalhos são discutidos.

Palavras-chave: Sistemas Dinâmicos, Caos, Bilhares Quânticos

Abstract

In classical dynamics, a dynamical system is characterized as *chaotic* through a positive Lyapunov exponent. In quantum mechanics, such a quantitative characterization of chaos, based on the separation of nearby trajectories in phase space, is not possible due to the uncertainty principle. Thus, it is natural to think that any possible quantum-classical relation in a chaotic system must show up in the semiclassical regime, *i.e.* in the highly excited eigenstates of the Hamiltonian of a closed system. Billiards are prototype systems in the ergodic theory of dynamical system. In a billiard, a particle is free to move in a planar domain Ω between specular reflections off its border Γ . The dynamics may vary from completely regular to fully chaotic depending solely on the geometry of Γ . Quantization of a billiard corresponds to the problem of a two-dimensional infinite quantum well with the same geometry. Thus, billiards enjoyed a great deal of interest in regard to the characterization of the quantum properties of a classically chaotic system, a field often called “quantum chaos”. The properties of interest are mostly universal statistical fluctuations of the highly excited energy eigenvalues and eigenfunctions in the spectra of chaotic systems. In this work, we focus on the numerical solution of the underlying Helmholtz equation associated with the two-dimensional quantum wells in chaotic geometries. For that, codes in C++ were developed, with the aid of the library presented in ([SANDERSON; CURTIN, 2016](#)) and ([SANDERSON; CURTIN, 2018](#)), in which we use a boundary method based on the idea of scaling, introduced by Vergini and Saraceno. With this method, one is able to compute efficiently hundreds of thousands of energy eigenvalues. After successful comparative tests with previous results, we studied popular spectral statistics in a few geometries of interest, in the presence of time reversal symmetry. Specifically, we investigated the nearest neighbor spacing distribution, the Dyson-Mehta Δ_3 spectral rigidity, and the presence of $1/f^\alpha$ noise in elliptical stadia and irrational triangles. The results are all consistent with predictions by random matrix theory. When the classical dynamics is strongly mixing, the statistics are close to those of the Gaussian orthogonal ensemble of random matrices. In the opposite limit, the one of regular integrable systems, the fluctuations exhibit a Poissonian character. For mixed (regular and chaotic) classical phase spaces, we observe intermediate statistics, as expected. Directions for possible work in the foreseen future are discussed.

Lista de Figuras

1.1	$ \psi ^2$ em estádios elípticos, calculadas via elementos finitos. As funções de onda no caso são “cicatrizadas” na vizinhança de órbitas periódicas clássicas (linhas contínuas) (LIMA; AGUIAR, 2015).	21
2.1	$ \psi ^2$ pra o estado fundamental do bilhar retangular com lados $a = \pi/3$ e $b = 1$ encontrado pelo método de Vergini e Saraceno.	34
3.1	Rigidez Espectral para os casos integrável (Poisson) e caótico (GOE).	41
3.2	Plot Comparativo de $p(s)$ obtido com os primeiros 145000 autovalores de energia acima dos primeiros 5000 autovalores, para o espectro exato (roxo), e para o espectro obtido pelo método de Vergini e Saraceno (verde).	43
3.3	<i>Plot Comparativo da estatística $\Delta_3(L)$ obtido com os primeiros 145000 autovalores de energia acima dos primeiros 5000 autovalores, para o espectro exato (linha sólida), e para o espectro obtido pelo método de Vergini e Saraceno (pontos).</i>	43
3.4	Plot comparativo da série de potência da estatística $\delta_n, S(k)$, obtida a partir das últimas 400 séries de 256 autovalores do espectro de 150000 autovalores obtido com a rotina de Vergine e Saraceno (pontos), e do fit-linear dos dados (linha sólida). $\alpha = -1.78$ obtido.	43
3.5	Quando $a = 1$, temos o estádio circular de Bunimovich, quando $a \neq 1$, temos o estádio elíptico.	44
3.6	Limites no espaço de parâmetros dos comportamentos conhecidos para o estádio elíptico.	44
3.7	Histograma representa $p(s)$ obtido para $a = 1.04$ e $t =$ (a) 0.0, (b) 0.01, (c) 0.05, (d) 0.15, (e) 0.286, (f) 0.67, curva cheia representa $p(s)$ para a distribuição de Poisson((a), (b)) e GOE ((c), (d), (e), (f)).	45
3.8	Valores de $\Delta_3(L)$ para $a = 1.04$ e t como no gráfico.	46
3.9	Ajuste linear para $\log(S(k))$ vs $\log(k)$ e os valores obtidos para o expoente α para (a) $t = 0.0$, $\alpha = -1.80$, (b) $t = 0.01$, $\alpha = -1.57$, (c) $t = 0.05$, $\alpha = -1.45$, (d) $t = 0.15$, $\alpha = -1.32$, (e) $t = 0.286$, $\alpha = -1.29$, (f) $t = 0.67$, $\alpha = -1.28$. .	46
3.10	Estado fundamental com $k = 4.341017$	47
3.11	851° estado excitado com $k = 100.6338$	47
3.12	87120° estado excitado com $k = 1000.018$	48
3.13	Histograma representando $p(s)$ para o caso $N = 7$ obtido pela rotina computacional, e distribuição para GOE representada pela linha sólida.	49
3.14	Histograma representando $p(s)$ para o caso $N = 8$ obtido pela rotina computacional, e distribuição para GOE representada pela linha sólida.	49

3.15	Δ_3 obtido para os triângulos $N = 7$ e $N = 8$ (linhas sólidas), comparados com as previsões para Poisson e GOE (linhas tracejadas).	50
3.16	$\log(S(k))$ vs $\log(k)$ e ajuste obtido para triângulos (a) $N = 7$, $\alpha = -1.12$ e (b) $N = 8$, $\alpha = -1.12$	50
3.17	Estado fundamental com $k = 8.387721$ para $N = 7$	50
3.18	252° estado excitado com $k = 101.6873$ para $N = 7$	51
3.19	104996° estado excitado com $k = 2000.095$ para $N = 7$	51

Sumário

1	Introdução	19
2	O Método de Vergini e Saraceno	23
2.1	Introdução	23
2.2	Reescrevendo o Problema	23
2.3	Abordagem Numérica	25
2.3.1	Cálculo Numérico das Integrais	26
2.3.2	Dimensão Numérica da Base: N	28
2.3.3	Truncando a Base	29
2.4	O Método de Vergini e Saraceno	30
2.4.1	Autofunções Reescaladas	31
2.4.2	Base Computacional de Helmholtz e o Método em Ação	32
2.5	Conclusões	34
3	Resultados	37
3.1	Introdução	37
3.1.1	Universalidade e Desdobramento (<i>Unfolding</i>)	37
3.1.2	Distribuição de Espaçamento entre Primeiros Vizinhos	39
3.1.3	Rigidez Espectral	41
3.1.4	Estatística δ_n e o Ruído $1/f^\alpha$	42
3.2	Estádio Elíptico	44
3.3	Triângulos Irracionais	48
3.4	Conclusões e Perspectivas	52
	Referências	53
	Apêndice	55
.1	Rotina Implementada para o método de Vergini e Saraceno	57
.2	Curriculum Vitae	70

1

Introdução

A caracterização do caos em sistemas quânticos ganhou interesse notável a partir da conjectura de Bohigas, Gianonni e Schmit (BGS) em meados dos anos 1980. (O. BOHIGAS; SCHMIT, 1984) A conjectura de BGS prevê que as flutuações espectrais de sistemas classicamente caóticos invariantes por reversão temporal seriam descritas universalmente pelas estatísticas previstas pelo *ensemble* gaussiano ortogonal (GOE) das matrizes aleatórias. (MEHTA, 2004) . Do ponto de vista experimental, núcleos atômicos complexos ofereciam espectros limitados para comparação, mas nenhum acesso a funções de onda. (WEIDENMÜLLER; MITCHELL, 2009) Por outro lado, a conjectura de BGS estava baseada em cálculos numéricos da solução da equação de Schrödinger em um sistema tecnicamente mais simples e adequado, um *bilhar*. Bilhares são modelos matemáticos protótipos na teoria ergódica de sistemas dinâmicos. Em um bilhar, uma partícula está confinada em uma região planar finita Ω , deslocando-se em movimento retilíneo uniforme entre colisões especulares com a fronteira Γ . A dinâmica resultante pode variar de completamente regular a totalmente caótica, dependendo apenas da geometria de Γ . (CHERNOV; MARKARIAN, 2006) A quantização de um bilhar remete ao problema de uma partícula confinada em um poço infinito bidimensional com a mesma geometria.

Ainda na década de 1980, a tecnologia de semicondutores permitia a fabricação de dispositivos submicrométricos (“pontos quânticos” em gases de elétrons bidimensionais) que prometiam, em associação com a universalidade prevista em bilhares, ambiente experimental para teste das previsões da teoria de matrizes aleatórias, com resultados ainda limitados. (BEENAKKER, 1997) Em 1990, Stöckmann e Stein (SS) (STÖCKMANN; STEIN, 1990) introduziram os bilhares de microondas, que dariam acesso experimental a autovalores e autofunções de energia sem precedentes. SS perceberam que modos TM em cavidades finas, de comprimento d na direção z e muito maiores no plano xy , com paredes perfeitamente condutoras, são matematicamente isomórficos ao bilhar quântico. Um requisito adicional para isso que as frequências das ressonâncias da cavidade de microondas estejam abaixo de $f_m = c/2d$. Para $d = 0.6$ cm, $f_m = 25$ GHz, facilmente atingida por geradores comerciais. Se no plano xy a cavidade tiver dimensões de dezenas de cm, teremos teoricamente entre $N_m = 1000$ e $N_m = 1500$ modos para trabalhar. Este número pode ser estimado pela fórmula de Weyl que prevê $N_m \sim Af_m^2$, onde A

é a área do bilhar. Cavidades fabricadas com condutores normais levam a um acesso com um número menor de modos devido à absorção nas paredes. Cavidades supercondutoras exibem uma vantagem maior, mas são mais caras e só um grupo de pesquisa tem produzido resultados com esse tipo de material.(DIETZ; RICHTER, 2015)

O isomorfismo matemático entre bilhares de microondas com as condições acima (condução perfeita e $f < c/2d$) e bilhares quânticos é expresso pela equação de Helmholtz na região planar Ω com condições de Dirichlet na fronteira Γ ,

$$\nabla^2 \psi(\vec{r}) = -k^2 \psi(\vec{r}), \text{ em } \Omega, \quad (1.1)$$

com

$$\psi(\vec{r}) = 0, \text{ em } \Gamma. \quad (1.2)$$

Para o bilhar quântico, esta é a equação de Schrödinger independente do tempo. O autovalor do laplaciano bidimensional está relacionado ao do hamiltoniano via $k^2 = 2mE/\hbar^2$, onde m é a massa da partícula confinada. Para o bilhar de microonda, $k^2 = (2\pi f/c)^2$, onde f é a frequência de ressonância de um dos modos da cavidade. Como no caso clássico, soluções exatas da equação de Helmholtz são conhecidas em poucas geometrias (retângulo, círculo, elipse, região anular concêntrica e alguns triângulos (60-60-60, 90-45-45 e 90-30-60)). A possibilidade de comparação entre teoria e experimentos proporcionada pelos bilhares de microondas incentivou pesquisas nessa área nas últimas décadas.

Uma expectativa teórica importante é a de que qualquer relação clássico-quântica deve se manifestar apenas em estados altamente excitados do hamiltoniano.(BERRY, 1984) No caso dos bilhares caóticos, isso requer a solução numérica da equação de Helmholtz em geometrias não integráveis. A possibilidade mais imediata seria a de se utilizar o método popular dos elementos finitos.(MENEZES; JAR; AGUIAR, 2007)(AGUIAR, 2008) Neste caso, a região Ω deve ser discretizada e a solução linearizada em cada mosaico, tipicamente triangular. As condições de contorno na fronteira e a continuidade nas divisas entre mosaicos vizinhos transformam o problema da equação diferencial parcial em um de diagonalização de uma matriz imensa para determinação dos coeficientes das soluções linearizadas em cada elemento. Esse método tem a vantagem de se poder tratar uma geometria arbitrária, mas tem também as desvantagens de ser faminto por memória, consumir muito tempo de CPU, e ter a precisão deteriorada na medida em que o comprimento $\lambda = 2\pi/k$ se aproxima do tamanho característico de um elemento do *mesh* que discretiza Ω . Em adição, a geração de um *mesh* razoavelmente uniforme para uma dada geometria pode ser por si só um problema desafiador, mas há na internet boas ofertas para este fim. A figura 1.1 mostra resultados obtidos por este método na geometria do estádio elíptico (LIMA; AGUIAR, 2015).

O crescimento do interesse na quantização de bilhares caóticos acarretou no desenvolvimento de métodos mais eficientes para a solução numérica da equação de Helmholtz

bidimensional. Tais técnicas são genericamente chamadas de “métodos de fronteira”. Em comum, a seguinte ideia: As soluções no interior de uma fronteira não integrável pode ser escrita como uma combinação linear das soluções exatas em um domínio integrável maior, para o qual a região irregular de interesse é um subconjunto interno. O problema, então, é o de se determinar o número de funções da base de autofunções do domínio maior cuja superposição satisfaz a condição de Dirichlet na fronteira do domínio não integrável interno, dentro de certa precisão, assim como seus coeficientes. Nesta dissertação, estudamos o método de *scaling* introduzido por Vergini e Saraceno (VS) (VERGINI; SARACENO, 1995), que permite o cálculo eficiente de centenas de milhares de autovalores e autofunções de energia em um bilhar quântico. O método de VS está descrito no Capítulo 2. No Capítulo 3, apresentamos resultados de propriedades espectrais em geometrias de interesse recente de nosso grupo, os triângulos irracionais (LIMA; RODRÍGUEZ-PÉREZ; AGUIAR, 2013) e os estádios elípticos (LIMA; AGUIAR, 2015). Especificamente, essas propriedades são (i) a distribuição de espaçamento entre primeiros vizinhos $p(s)$, (ii) a rigidez espectral de Dyson-Mehta Δ_3 e (iii) a presença de ruído do tipo $1/f^\alpha$ nos espectros de autovalores de energia. Perspectivas futuras são discutidas ao final desse mesmo capítulo.

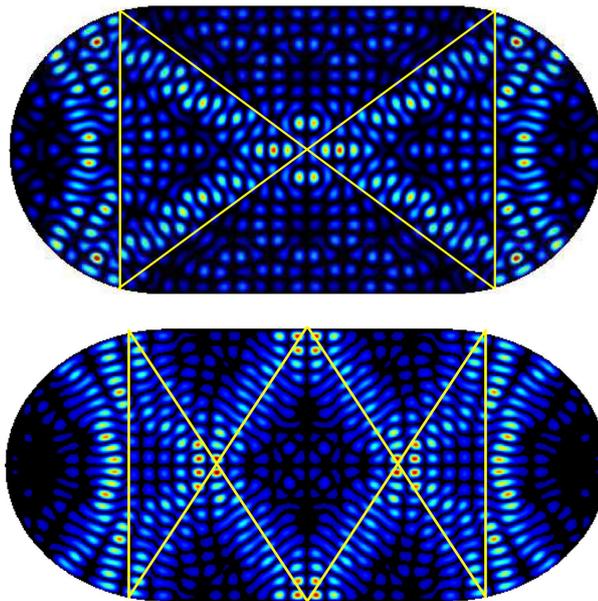


Figura 1.1: $|\psi|^2$ em estádios elípticos, calculadas via elementos finitos. As funções de onda no caso são “cicatrizadas” na vizinhança de órbitas periódicas clássicas (linhas contínuas) (LIMA; AGUIAR, 2015).

2

O Método de Vergini e Saraceno

2.1 Introdução

Quando o Hamiltoniano de um problema de mecânica quântica não depende explicitamente do tempo, o estado quântico sempre poderá ser descrito por componentes com dependência temporal harmônica ($\exp[-(iEt)/\hbar]$). Cada componente tem uma parte estacionária que é solução da Equação de Schroedinger Independente do Tempo (ESIT):

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.1)$$

que é uma equação de auto valores para o operador hermitiano \hat{H} .

Se o Hamiltoniano é infinito ou muito maior que as energias de interesse para o problema, fora de uma região finita do espaço Ω , com fronteira dada pela superfície simples Γ ; os estados do problema serão limitados ao interior de Ω , satisfazem a condição de contorno de Dirichlet $\psi(x) = 0, \forall x \in \Gamma$, e as energias do problema E_n serão discretas (COHEN-TANNOUJJI; DIU; LALOE, 1991). Para as aplicações nesse trabalho, o interesse é resolver a ESIT para esse caso de espectro discreto.

Para alguns poucos casos existe solução analítica para a equação 2.1, porém para a enorme maioria dos casos, uma abordagem numérica se faz necessária. Neste capítulo, explanaremos o funcionamento do método desenvolvido por Vergini e Saraceno (VS), escolhido nesse trabalho por apresentar vantagens em relação a métodos convencionais para a resolução do problema.

2.2 Reescrevendo o Problema

Queremos reescrever o problema de modo mais conveniente para a aplicação do método. Estamos interessados na dinâmica de sistemas associados a partículas livres de potenciais no interior de uma dada região Ω , limitada por um potencial muito maior que as energias permitidas à partícula, idealmente considerado infinito. Nessas condições O Hamiltoniano do sistema, para o interior da região Ω , é dado somente pela sua parte cinética, na representação do operador

posição \mathbf{r} , dado por $\sim \nabla^2$. Levando em consideração isso, e escolhendo um sistema de unidades de tal modo que a energia do sistema será dada em unidades de $E = (\hbar k)^2/2m$, a equação que descreve o nosso problema é exatamente a equação de Helmholtz. E queremos substituir a ESIT pelo seguinte sistema de equações,

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\mathbf{r}) = 0, \forall r \in \Omega \quad (2.2)$$

$$f[\psi] = 0, \quad (2.3)$$

$$g[\psi] = 1, \quad (2.4)$$

onde $-k^2$ é o autovalor. Os funcionais f e g retornam escalares e são quadráticos na função de onda ψ . A equação 2.2 é a equação de Helmholtz, 2.3 incorpora as condições de contorno e 2.4 se refere a normalização da função de onda ψ .

A condição de contorno no geral pode ser escrita como,

$$(\mathcal{L}\psi)(r) = h(r), \forall r \in \Gamma \quad (2.5)$$

onde \mathcal{L} é um operador linear.

Da maneira como reescrevemos a equação de Helmholtz, a satisfação da condição de contorno é verificada por um único número $f[\psi]$. Esse número mede a norma quadrática de uma função erro a ser definida, e então é não-negativo. Essa função erro mede o quanto uma dada solução falha em obedecer a condição de contorno. Faremos uso do termo definido por Heller (HELLER, 1991), autor do Método da Decomposição em Ondas Planas (MDOP), que nomeia o funcional f de 'Tensão'. A definição da Tensão f , é dada por:

$$f[\psi] \equiv \oint_{\Gamma} w(\mathbf{r}) d\mathbf{r} |(\mathcal{L}\psi)(\mathbf{r})|^2 \quad (2.6)$$

onde $w(\mathbf{r}) \geq 0$ é uma função peso definida sobre a fronteira Γ . Uma escolha possível para o problema com condição de contorno de Dirichlet é: $w(\mathbf{r}) = 1$ e $(\mathcal{L}\psi) \equiv \psi(\mathbf{r}), \mathbf{r} \in \Gamma$. Nesse caso f mede apenas a integral da norma ao quadrado da função de onda na fronteira Γ .

Fica ao encargo de g impor a condição de normalização, ou seja, uma definição possível para g ,

$$g[\psi] \equiv \langle \psi | \psi \rangle_{\Omega} = \int_{\Omega} d\mathbf{r} |\psi(\mathbf{r})|^2 \quad (2.7)$$

neste caso g representa a norma ao quadrado da função de onda na região Ω .

Quando k se aproxima de um autovalor k_n , $f[\psi]$ se aproxima de zero e o problema é satisfeito. O problema como descrito acima representa o Problema do Biliar Quântico (PBQ) Ω com fronteira Γ .

2.3 Abordagem Numérica

Como descrito anteriormente, para a grande maioria dos casos o PBQ não tem solução analítica, e uma abordagem numérica se faz necessária. Vamos falar primeiro das ideias associadas ao MDOP de Heller que embasam o método de Vergini e Sarraceno apresentado posteriormente.

Para descrever uma solução geral para o problema $\psi(\mathbf{r})$, precisamos escolher uma base. Como o problema é descrito pela equação de Helmholtz, é razoável fazer a escolha de uma base formada apenas por soluções para a equação de Helmholtz na região Ω . De maneira geral, uma solução qualquer não satisfaz as condições de contorno para o PBQ em questão, então tomarei como base, soluções analíticas que possuem a forma mais simples possível; que são as soluções de partícula livre.

Para essa escolha de base, podemos tomar as funções como sendo todas reais e casos típicos delas são as Ondas Planas Reais (OPR), Ondas Planas Evanescentes (OPE) e estados de momento angular. Cada uma dessas funções depende do número de onda k . Seguindo o método de Heller MDOP, a escolha será tomar como base as OPR, igualmente espaçadas em ângulo. O número de elementos utilizados na base N será discutido.

A base então será dada pelo conjunto contendo N elementos,

$$\{\phi_n(k; \mathbf{r}), \quad n = 1, \dots, N\}, \quad (2.8)$$

escrevendo a solução nessa base ficamos com,

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^N c_n \phi_n(k; \mathbf{r}), \quad (2.9)$$

e para satisfazer as condições de contorno e de normalização ficamos com,

$$\begin{aligned} f[\psi(\mathbf{r})] &= \oint_{\Gamma} d\mathbf{r} |\psi(\mathbf{r})|^2 \\ &= \oint_{\Gamma} d\mathbf{r} \psi(\mathbf{r})^* \psi(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{i,j=1}^N c_i^* \oint_{\Gamma} d\mathbf{r} \phi_i(k; \mathbf{r}) \phi_j(k; \mathbf{r}) c_j \\ &= \sum_{i,j=1}^N F_{ij} c_i^* c_j \end{aligned} \quad (2.10)$$

Onde F_{ij} é dado por,

$$F_{ij} = \oint_{\Gamma} d\mathbf{r} \phi_i(k; \mathbf{r}) \phi_j(k; \mathbf{r}). \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned}
g[\psi(\mathbf{r})] &= \int_{\mathcal{R}} d\mathbf{r} |\psi(\mathbf{r})|^2 \\
&= \int_{\mathcal{R}} d\mathbf{r} \psi(\mathbf{r})^* \psi(\mathbf{r}) \\
&= \sum_{i,j=1}^N c_i^* \int_{\mathcal{R}} d\mathbf{r} \phi_i(k;\mathbf{r}) \phi_j(k;\mathbf{r}) c_j \\
&= \sum_{i,j=1}^N G_{ij} c_i^* c_j
\end{aligned} \tag{2.12}$$

Onde G_{ij} é dado por,

$$G_{ij} = \int_{\mathcal{R}} d\mathbf{r} \phi_i(k;\mathbf{r}) \phi_j(k;\mathbf{r}). \tag{2.13}$$

Para podermos realizar uma varredura e encontrar a melhor solução em torno de um dado valor de número de onda k , a condição 2.3 precisa ser flexibilizada,

$$f[\psi] = \min, \tag{2.14}$$

assim poderíamos reescrever as condições impostas pelas equações 2.3 e 2.4 pelo sistema em forma matricial,

$$\begin{cases} \mathbf{c}^\dagger F \mathbf{c} = \min, \\ \mathbf{c}^\dagger G \mathbf{c} = 1 \end{cases} \tag{2.15}$$

Ao representar a solução em termos de uma base, o funcional tensão f passa a ser representado pela matriz da tensão F como definida acima, assim como o funcional g passa a ser a matriz G . Satisfazer 2.15 é equivalente à (ARFKEN, 1985),

$$G(k)\mathbf{c} = \lambda F(k)\mathbf{c}, \tag{2.16}$$

o autovalor máximo é λ_M , e λ_M^{-1} é simplesmente a tensão mínima ou seja, a tensão correspondente à 'melhor' solução encontrada com a base truncada em N elementos como dada.

O método aqui proposto então é equivalente a encontrar o maior autovalor da equação 2.16 em função de k . Discutiremos a seguir alguns problemas relativos a implementação numérica de um método como esse.

2.3.1 Cálculo Numérico das Integrais

O cálculo direto da integral de linha sobre a fronteira Γ pode ser um trabalho computacionalmente custoso quando se quer usar um método de varredura como o apresentado. Utilizaremos

a discretização da fronteira como ferramenta para aproximar o valor de integrais desse tipo.

A matriz que representa o funcional Tensão, ao parametrizarmos a curva que representa a fronteira Γ por um parâmetro s , toma a forma,

$$F_{ij} = \oint_{\Gamma} j_i(s) h_j(s) ds, \quad (2.17)$$

a ideia é utilizar a aproximação,

$$F = \oint ds f(s) \longrightarrow \frac{L}{M} \sum_{i=1}^M f(s_i), \quad (2.18)$$

onde L é comprimento da curva fechada sobre a qual se está integrando e M a quantidade de pontos sobre ela. Estando os M pontos igualmente espaçados sobre a curva, L/M representa o comprimento de uma das subdivisões ds , particionadas sobre a curva. Então estaríamos aproximando a integral por uma soma do produto de segmentos de comprimento igual da curva com o valor da função num ponto no intervalo desse segmento. Assim para 2.17, ficamos com,

$$F = \frac{L}{M} J^T H, \quad (2.19)$$

onde,

$$J_{im} = j_m(s_i) \quad \& \quad H_{im} = h_m(s_i). \quad (2.20)$$

Utilizando essa abordagem o preenchimento da matriz F requer $\mathcal{O}(NM)$ atribuições de valores, e o produto matricial requer $\mathcal{O}(N^2M)$ operações, mas sendo todas eles simples multiplicações e somas. Uma discussão sobre a convergência, para um dado número M de pontos de amostra, e acurácia dessa abordagem é apresentada em (BARNETT, 2000).

Uma análise mais detalhada de G por outro lado, mostra que o cálculo direto da integral definida sobre o domínio é uma tarefa computacionalmente bem mais custosa. Ela envolve calcular N^2 superposições, $\langle \phi_i | \phi_j \rangle_{\Omega}$ cada uma representando integrais duplas sob o domínio Ω . Se isso tivesse de ser calculado explicitamente, boa parte das vantagens dos métodos de fronteira seriam perdidos. Afim de contornar esse problema vamos deduzir um resultado que nos permite converter a integral sobre o domínio Ω em uma integral sobre a fronteira Γ .

Suponha duas soluções da equação de Helmholtz 2.2, α e β com números de onda, respectivamente, k_{α} e k_{β} . Observemos que (aqui a convenção de soma de Einstein será usada para ajudar no passo intermediário) :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\alpha \nabla \beta) &= \partial_j (\alpha \partial_j \beta) \\ &= \partial_j \alpha \partial_j \beta + \alpha \partial_j^2 \beta \\ &= \nabla \alpha \cdot \nabla \beta + \alpha \nabla^2 \beta \end{aligned} \quad (2.21)$$

Integrando 2.21 sobre o domínio Ω , aplicando o Teorema da Divergência de Gauss ao lado esquerdo e usando o fato de β ser solução da 2.2, ficamos com,

$$\oint_{\Gamma} ds(\alpha \partial_n \beta) = \int_{\mathcal{R}} d\mathbf{r}(-k_{\beta}^2 \alpha \beta + \nabla \alpha \cdot \nabla \beta), \quad (2.22)$$

onde $\partial_n = \mathbf{n} \cdot \nabla$ representa a derivada normal, e \mathbf{n} é o campo normal orientado para fora de Ω . É importante a distinção de dois casos: (i) $k_{\alpha} \neq k_{\beta}$ e (ii) $k_{\alpha} = k_{\beta}$.

Para (i), subtraindo de 2.22 a mesma equação substituindo α por β , ficamos com,

$$\int_{\mathcal{R}} d\mathbf{r}(\alpha \beta) = \frac{1}{k_{\alpha}^2 - k_{\beta}^2} \oint_{\Gamma} ds(\alpha \partial_n \beta - \beta \partial_n \alpha), \quad (2.23)$$

para o caso (ii), faremos $k_{\alpha} = k$ e tomaremos $k_{\beta} = k + \delta$ e tomaremos o limite em que $\delta \rightarrow 0$. Observando que (expansão feita novamente em 2.36),

$$\beta(k + \delta, \mathbf{r}) = [1 + \frac{\delta}{k} \mathbf{r} \cdot \nabla + \mathcal{O}(\delta^2)] \beta(k, \mathbf{r}), \quad (2.24)$$

e que $k_{\alpha}^2 - k_{\beta}^2 = 2\delta k$. Substituição em 2.23 e tomando o limite nos dá,

$$\int_{\mathcal{R}} d\mathbf{r}(\alpha \beta) = \oint_{\Gamma} ds[(\mathbf{n} \cdot \nabla \alpha)(\mathbf{r} \cdot \nabla \beta) - \alpha \mathbf{n} \cdot \nabla(\mathbf{r} \cdot \nabla \beta)], \quad (2.25)$$

mas aplicando as condições de contorno de Dirichlet, substituindo $\mathbf{r} \cdot \nabla \beta = (\mathbf{r} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{n} \cdot \nabla \beta)$ (o que é possível notando que em Γ , \mathbf{n} e $\nabla \beta$ são paralelos) ficamos com,

$$\int_{\mathcal{R}} d\mathbf{r}(\alpha \beta) = \frac{1}{k^2} \oint_{\Gamma} ds(r_n)(\partial_n \alpha)(\partial_n \beta), \quad (2.26)$$

com $r_n = \mathbf{r} \cdot \mathbf{n}$. Assim podemos reescrever a integral sobre o domínio em termos de uma integral de sobre a fronteira, em termos das derivadas normais e do campo normal. Ficando com,

$$G_{ij} = \frac{1}{k^2} \oint_{\Gamma} ds(r_n)(\partial_n \phi_i)(\partial_n \phi_j) \quad (2.27)$$

e G então pode ser calculado com o mesmo procedimento usado em 2.19.

2.3.2 Dimensão Numérica da Base: N

Uma primeira análise numérica das matrizes F e G mostra, que para um dado valor de k , a partir de um valor suficientemente alto para N , ambas se tornam singulares. Isso representa um primeiro problema de implementação pois as rotinas implementadas tem dificuldade de lidar com problemas singulares de autovalores generalizados como esse. O fato das matrizes que representam os funcionais se tornarem singulares aparentemente é um consequência da escolha da base e existe uma maneira de contornar o problema.

Primeiramente, podemos argumentar que fisicamente, o fato da base ser composta por soluções arbitrárias da equação de Helmholtz 2.2 com um único número de onda k , impõe uma

certa restrição ao número de graus de liberdade dos elementos da base para uma região finita do espaço (aqui o nosso bilhar definido na região Ω). Isso pode ser entendido intuitivamente (BARNETT, 2000) observando que duas OPR com distância angular muito menor que $(kL)^{-1}$, onde L é o perímetro do bilhar, não podem ser distinguidas quando somente seus valores dentro do bilhar são observados. Mais formalmente, como visto em (DIETZ; SMILANSKY, 1993), para bilhares convexos com dimensão $d = 2$, há um valor efetivo para o truncamento da base, *tamanho semiclássico da base* $N_{SC} = kL/\pi$, com L sendo o perímetro do bilhar.

O surpreendente é que para quantidades de elementos da base acima de N_{SC} os autovalores de F caem exponencialmente para valores abaixo de $\sim 10^{-16}$ (BARNETT, 2000), que é a precisão numérica de double-floating. Isso se traduz em um limite prático para a dimensão da base numérica utilizada N , e de fato tentativas de melhorar a acurácia numérica aumentando o número de elementos da base usada para expandir a solução numérica se mostram imateriais, diferentemente do que ocorre nos métodos convencionais para resolver a equação de Helmholtz como os Métodos de Elementos Finitos (MEF).

Com a utilização de OPR como únicos elementos da base que varre o espaço das soluções, o método impõe um auto truncamento da base. Adição de ondas planas à base tem pouca ou nenhuma influência sobre a acurácia do método, pois as componentes contribuiriam em subespaços de autovalor numericamente nulos. Melhor acurácia poderia ser tentada por exemplo adicionando à base outros tipos de solução arbitrária da equação de Helmholtz 2.2 como por exemplo (OPE) (VERGINI, 1994).

2.3.3 Truncando a Base

A ideia é que truncando a base para um número de elementos próximo a N_{SC} e eliminando os auto espaços com autovalores numericamente nulos, o problema da singularidade das Matrizes F e G é resolvido. Isso quer dizer que vamos ignorar os subespaços que não contribuem mais que uma acurácia de ε para ψ dentro da região do bilhar.

Uma vez que diagonalizamos a matriz F , encontramos a base de autovetores α , construímos a mudança de base entre a base de Helmholtz ϕ e a base de autovalores α , I . I é ortogonal de modo que, podemos reescrever F da seguinte maneira,

$$F = I^T \Lambda I, \quad (2.28)$$

onde Λ é,

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \lambda_N \end{bmatrix}, \quad (2.29)$$

onde aqui ordenamos os autovalores em ordem decrescente, de modo que truncar significa eliminar os autovalores posteriores ao último $\lambda_{N_\varepsilon} > \varepsilon$. Ou seja ficamos com um subespaço

efetivo de dimensão N_e e então definimos Λ_e ,

$$\Lambda_e = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \lambda_{N_e} \end{bmatrix}, \quad (2.30)$$

e I_e tomando as N_e primeiras colunas de I . De modo que podemos reescrever nesse subespaço efetivo a 2.16, aplicando a transformação $I_e \Lambda_e^{-1/2}$ como,

$$G_e \mathbf{c}_e = \lambda \mathbf{c}_e, \quad (2.31)$$

onde usamos o fato de,

$$\Lambda_e^{-1/2} I_e^T F I_e \Lambda_e^{-1/2} = \mathbb{I}_e, \quad (2.32)$$

com \mathbb{I}_e a identidade do subespaço com dimensão N_e . E Temos:

$$G_e = \Lambda_e^{-1/2} I_e^T G I_e \Lambda_e^{-1/2}, \quad (2.33)$$

e,

$$\mathbf{c}_e = \Lambda_e^{1/2} I_e \mathbf{c}, \quad (2.34)$$

deste modo obtemos um problema de autovalor simples não-singular. O procedimento então seria diagonalizar F , escolher ε , construir I_e e Λ_e o que nos permite calcular G_e . Uma vez calculados os autovalores λ_n de G_e e seus respectivos autovetores \mathbf{c}_e^n , usando o inverso da relação 2.34, encontraríamos os autovetores originais \mathbf{c}^n . Analisando esse método, a solução que melhor satisfaz as condições de contorno seria a produzida pelo maior autovalor λ^1 e a tensão mínima associada a essa melhor solução seria $(\lambda^1)^{-1}$.

2.4 O Método de Vergini e Saraceno

Diferentemente de um método de varredura como o mostrado na sessão anterior, o método de escala de Vergini e Saraceno encontra todos os estados numa faixa de largura $\mathcal{O}(L^{-1})$ em torno de um dado número de onda k , usando uma única diagonalização com esforço semelhante ao encontrado na utilização do método da sessão anterior.

O sucesso do método é devido basicamente ao fato descoberto por E. Vergini e M. Saraceno (VERGINI, 1994), (VERGINI; SARACENO, 1995), que é um dado operador tensão F ter representação matricial quasi-diagonal quando escrito numa base de autofunções exatas reescaladas do bilhar. O que quer dizer que as autofunções reescaladas do bilhar são quasi-ortogonais na fronteira Γ do bilhar. Uma explicação formal pra esse fato infelizmente ainda não foi dada.

2.4.1 Autofunções Reescaladas

Seja $\psi(\mathbf{r})$ uma solução da equação de Helmholtz 2.2, com número de onda k_0 , então sua versão reescalada $\psi(k; \mathbf{r})$ também é solução da 2.2, com número de onda k , e é definida por:

$$\psi(k; \mathbf{r}) \equiv \psi\left(\frac{k}{k_0} \mathbf{r}\right) \quad (2.35)$$

Escolhemos a base das autofunções exatas para o bilhar $\psi_\mu(k; \mathbf{r})$ reescaladas como acima para todas possuírem o mesmo número de onda k . Embora as autofunções exatas $\psi_\mu(\mathbf{r})$ satisfaçam a condição de contorno e se anulem na fronteira Γ , o mesmo não acontece com as autofunções reescaladas, elas se anulam em versões reescaladas, Γ_μ , da fronteira (dilatadas ou contraídas).

A derivada da função de onda em um ponto \mathbf{r} , em relação a k será dada por,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial k} \psi(k; \mathbf{r})|_{k=k_0} &= \frac{1}{k_0} \frac{\partial}{\partial \alpha} \psi(\alpha \mathbf{r})|_{\alpha=1} \\ &= \frac{1}{k_0} \mathbf{r} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}) \end{aligned}, \quad (2.36)$$

para k próximo à k_0 , temos $k = k_0 + \delta$, e podemos escrever usando 2.36,

$$\psi(k_0 + \delta; \mathbf{r}) = \left[1 + \frac{\delta}{k_0} \mathbf{r} \cdot \nabla + \dots \right] \psi(\mathbf{r}). \quad (2.37)$$

Para um elemento da base de autofunções reescaladas, se escolhermos um $k \sim k_\mu \rightarrow k = k_\mu + \delta_\mu$ (com $\delta_\mu \ll 1/L^{-1}$), teremos Γ muito próximo a Γ_μ . Fazendo uso de 2.37 e do fato que na fronteira $\nabla \psi$ e n são paralelos,

$$\psi_\mu(k; \mathbf{r}) = \frac{\delta_\mu}{k_\mu} r_n \partial_n \psi_\mu(\mathbf{r}) + \dots, \mathbf{r} \in \Gamma, \quad (2.38)$$

uma função de onda reescalada qualquer pode ser escrita em termos da base das autofunções reescaladas como,

$$\psi(k; \mathbf{r}) = \sum_{\mu} \tilde{x}^{(\mu)} \psi_\mu(k; \mathbf{r}), \quad (2.39)$$

usando a definição geral para a tensão obedecendo as condições de contorno de Dirichlet,

$$f[\psi] = \oint_{\Gamma} d\mathbf{r} w(\mathbf{r}) |\psi(\mathbf{r})|^2, \quad (2.40)$$

o que nos dá, para sua representação matricial,

$$\begin{aligned}
\tilde{F}_{\mu\nu} &= \oint_{\Gamma} d\mathbf{r} w(\mathbf{r}) \psi_{\mu}(k; \mathbf{r}) \psi_{\nu}(k; \mathbf{r}) \\
&= \frac{\delta_{\mu} \delta_{\nu}}{k_{\mu} k_{\nu}} \oint_{\Gamma} d\mathbf{r} w(\mathbf{r}) r_n^2 (\partial_n \psi_{\mu}) (\partial_n \psi_{\nu}) + \mathcal{O}^3, \\
&\approx 2\delta_{\mu} \delta_{\nu} M_{\mu\nu} + \mathcal{O}^3
\end{aligned} \tag{2.41}$$

com M definido como,

$$M_{\mu\nu} = \frac{1}{2k^2} \oint_{\Gamma} d\mathbf{r} w(\mathbf{r}) r_n^2 (\partial_n \psi_{\mu}) (\partial_n \psi_{\nu}), \tag{2.42}$$

onde foi usada a aproximação $k \approx k_{\mu} \approx k_{\nu}$. Que é razoável, uma vez que estamos escolhendo estados com pequenas flutuações em torno do número de onda k . Observando ainda que para pequenas flutuações em k , M varia muito lentamente, quando comparado a \tilde{F} , podemos considerar M constante.

Então, toda a vantagem do método se materializa ao encontrar uma função peso, $w(\mathbf{r})$, apropriada, de modo que a representação da tensão \tilde{F} e por conseguinte M , na base de autofunções reescaladas, sejam quasi-diagonais. O que foi percebido por Vergini e Saraceno é que essa função peso é $w(\mathbf{r}) = 1/r_n$.

2.4.2 Base Computacional de Helmholtz e o Método em Ação

Na prática, assim como na sessão anterior, computacionalmente precisamos de uma base conhecida. A base escolhida será semelhante à usada no (MDOP) de Heller, composta no geral por (OPR) ou (OPR) + (OPE). Então, uma autofunção reescalada do bilhar pode ser escrita em termos da base computacional de Helmholtz ϕ , da seguinte maneira:

$$\psi_{\mu}(k; \mathbf{r}) = \sum_i c_i^{(\mu)} \phi_i(k; \mathbf{r}) \tag{2.43}$$

Na sessão anterior a forma da dependência em k dos elementos da base $\phi_i(k; \mathbf{r})$ não era relevante, a única exigência é que todas as funções tivessem o mesmo k . Aqui precisamos que a dependência seja da forma:

$$\phi_i(k; \mathbf{r}) = \phi_i(k\mathbf{r}). \tag{2.44}$$

Desse modo, como a dependência em k nas autofunções reescaladas é semelhante à da base ϕ , temos um vetor de componentes $\mathbf{c}^{(\mu)}$ que permanece constante enquanto k muda.

O método de (VS) usa o funcional tensão F como uma norma sobre a fronteira, e sua derivada em relação a k , dF/dk , que pode ser calculado de 2.41, usando o fato de que a dependência em k está em $\delta_{\mu} = k - k_{\mu}$, de modo que $d\delta/dk = 1$, e ficamos com:

$$\frac{dF}{dk} = 2(\delta_\mu + \delta_\nu)M_{\mu\nu} \quad (2.45)$$

Onde os termos de ordem superior em δ foram descartados. Então, como F é quasi-diagonal, M também é, e por conseguinte, dF/dk também é quasi-diagonal na representação da base de autofunções reescaladas do bilhar.

Deste modo podemos relacionar a base computacional com a base das autofunções reescaladas, via uma transformação linear C que faz com que as representação de F e dF/dk sejam quasi-diagonais. Com $C_{i\mu} = c_i^{(\mu)}$. No geral as representações estão em espaços de dimensão distinta, logo $C_{i\mu}$ é retângular. E as representações ficam relacionadas por:

$$\tilde{F} = C^T F C \quad (2.46)$$

$$\frac{d\tilde{F}}{dk} = C^T \frac{dF}{dk} C \quad (2.47)$$

Assim os autovetores de F na base computacional, dão uma ótima aproximação para as colunas de C , o mesmo deve acontecer para os autovetores de dF/dk . Para interpretar de maneira única os autovalores, o método propõe uma diagonalização simultânea:

$$\left[\frac{dF}{dk} - \lambda_\mu F \right] \mathbf{c}^\mu = 0 \quad (2.48)$$

A diagonalização simultânea retorna então os autovetores de dF/dk tratando F como uma norma definida sob a fronteira. Isso permite a eliminação de subespaços numericamente nulos da mesma maneira que na sessão 2.3.3, a partir da escolha de um ε . O fato de ambas as matrizes serem quasi-diagonais, faz com que os autovetores retornados da diagonalização de dF/dk e F na base computacional, sejam uma ótima aproximação pra a transformação C , que permite encontrar as componentes das autofunções reescaladas na base computacional.

A primeira ordem da expansão 2.41 dos elementos da diagonal de \tilde{F} seria $2\delta_\mu^2$, já os de dF/dk seria $4\delta_\mu$. O autovalor generalizado da diagonalização simultânea é dado pela razão dos 2. Assim a predição para o número de onda fica:

$$k_\mu = k - \frac{2}{\lambda_\mu} \quad (2.49)$$

O método calcula então TODAS as autofunções reescaladas que estão numa faixa de número de onda da ordem de 1, para sistemas com $L \approx 1$. Mais precisamente o, o grande ganho de performance associado ao método de Vergini e Saraceno é que para um número de onda k , um comprimento típico do sistema L , em uma única diagonalização $\sim (kL)$ estados são encontrados.

Para avaliar o funcionamento da implementação feita foi calculado o espectro do caso solúvel analiticamente do bilhar retangular com lados irracionais entre si, $a = \pi/3$ e $b = 1$. Usei a rotina para calcular os primeiros 150000 autovalores, o que tomou cerca de 9h. $|\psi|^2$ pra o

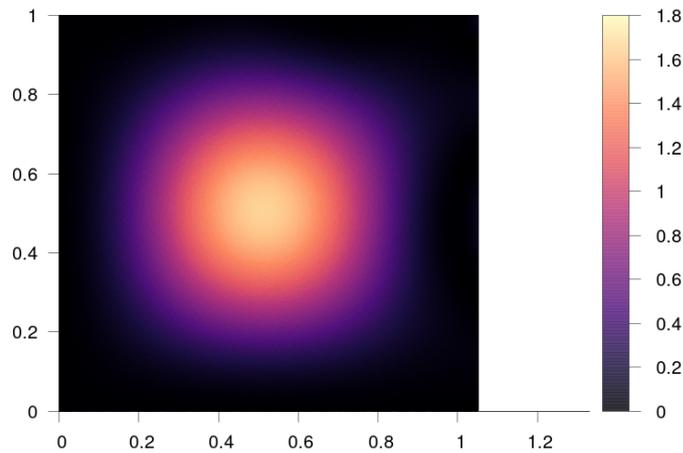


Figura 2.1: $|\psi|^2$ pra o estado fundamental do bilhar retangular com lados $a = \pi/3$ e $b = 1$ encontrado pelo método de Vergini e Saraceno.

estado fundamental é plotado na figura 2.1, $k_0 = 4.3439156$. A distribuição $p(s)$ encontrada é mostrada na figura 3.2. Também foi feita a série de potência para a estatística δ_n , $S(k)$, plotado em gráfico $\log - \log$ na figura 3.4, e extraído por fit-linear o expoente α . O valor obtido para o espectro exato foi de $\alpha = -1.776 \pm 0.001$. Uma variação $\Delta\alpha \sim 0.24\%$ com o valor obtido com espectro resultante da rotina do método.

2.5 Conclusões

Dado que o método de VS possui a mesma característica do método de fronteira de Heller apresentado na sessão 2.3, de impor um truncamento à base computacional, a adição indiscriminada de elementos na base computacional não melhora a precisão numérica. Por outro lado, é sabido que a adição de algumas OEP à base composta por OPR é uma boa maneira de se obter maiores precisões numéricas. Embora esse possa ser um caminho a se seguir, um método geral de adição de OEP à base, pra qualquer geometria ainda é desconhecido. A não diferenciabilidade da fronteira em todos os pontos (vértices de polígonos, por exemplo), aparentemente é um problema que diminui a resolução do cálculo dos funcionais F e dF/dk o que por conseguinte acaba diminuindo a resolução efetiva do método. Uma maneira apropriada de contornar isso, no caso geral, ainda não foi encontrada. Outra coisa que pode ser tentada com o intuito de melhorar à acurácia do método é tomar ordens superiores na expansão 2.41. Uma discussão sobre as consequências computacionais dessa abordagem é apresentada em

([BARNETT, 2000](#)).

O objetivo do trabalho apresentado aqui é aplicar o método de VS ao cálculo do espectro de bilhares e fazer um tratamento estatístico desses espectros. Maiores precisões numéricas do que as que o método possibilita usando apenas bases formadas puramente por OPR não se fizeram necessárias.

3

Resultados

Após uma breve introdução das propriedades espectrais usadas para caracterização, apresentaremos os resultados para o bilhar do estádio elíptico, derivado do estádio circular de Bunimovich, e para uma família de triângulos irracionais formados por triângulos com lados $N, N+1, N+2, N \in \mathcal{N}, N > 3$. Os espectros foram obtidos com a rotina escrita em C/C++ pelo autor, onde foi implementado o método de Vergini e Saraceno.

3.1 Introdução

3.1.1 Universalidade e Desdobramento (*Unfolding*)

A procura por características universais é uma atividade frequente em áreas como fenômenos críticos, transições de fases e dinâmica não linear. Lembramos aqui que os sistemas dinâmicos de interesse nesta dissertação são conservativos, de modo que a evolução temporal de um conjunto de pontos no espaço de fases de um desses sistemas preserva o volume por eles ocupado. Em outras palavras, não existem *atratores* como nos sistemas dissipativos não lineares. Os pontos fixos de um sistema hamiltoniano ou são do tipo elíptico (“centro”), sem variedades, ou hiperbólico (“ponto de sela”), com as variedades estável e instável. A distribuição de tais pontos é que determina as frações regular e caótica do espaço de fases. O caos está associado à presença de pontos fixos hiperbólicos. Resumidamente, dizemos que o espaço de fases é misto quando ele possui as regiões regular e caótica, estando o caos associado à presença de pontos fixos hiperbólicos. As *bifurcações* nos sistemas conservativos estão, assim, associadas a uma mudança na configuração desses pontos quando um parâmetro de controle é variado. Por exemplo, o espaço de fases de um bilhar circular não possui pontos fixos hiperbólicos. Ele é completamente regular. Dividindo o círculo em duas metades ao longo de um diâmetro e afastando através de dois segmentos paralelos entre si nos pontos da fronteira, e perpendiculares ao diâmetro separador, criamos uma nova geometria conhecida como estádio de Bunimovich. Neste caso, a região Ω é composta de uma porção retangular central de espessura t ensanduichada pelas metades circulares. Bunimovich demonstrou que para qualquer valor não nulo de t o bilhar

é caótico [CHERNOV & MARKARIAN]. Temos, portanto, uma bifurcação abrupta de um sistema completamente regular para outro completamente caótico (a menos de algumas órbitas periódicas instáveis de medida nula). Se repetirmos este processo com uma elipse de semi-eixo maior a , ao invés do círculo, a situação muda dramaticamente e a transição para o caos vai depender dos dois parâmetros t e a . Voltaremos ao estádio elíptico adiante. Em tempo, o que seria, então, uma característica universal na quantização de sistemas hamiltonianos?

Para se encontrar propriedades espectrais comuns a sistemas diversos como núcleos complexos, pontos quânticos em um gás de elétrons, átomo de hidrogênio em campo magnético elevado e, claro, bilhares quânticos, devemos fazer um tratamento inicial nos autovalores de energia conhecido como *unfolding*, aqui traduzido por *desdobramento*. O espectro desdobrado de um dado sistema deve ter o valor médio do espaçamento entre primeiros vizinhos igual a 1. Então, se $p(s)ds$ é a probabilidade de se encontrar dois níveis vizinhos mais próximos separados por uma distância entre s e $s + ds$ no espectro desdobrado, devemos ter

$$\int_0^{\infty} p(s)ds = 1 \quad (3.1)$$

e

$$\int_0^{\infty} sp(s)ds = 1. \quad (3.2)$$

Precisamos, então, de uma transformação $f(E)$ que nos leve do espectro original $\{E_i\}_{i=1}^{\infty}$ para o espectro desdobrado $\{\varepsilon_i\}_{i=1}^{\infty}$. Para isso, considere um intervalo ΔE com centro em E , onde existem ΔN níveis. ΔE deve ser grande o suficiente para que $\Delta N \gg 1$ e pequeno o suficiente para que a densidade $\rho(E) = \Delta N/\Delta E$ seja suave. Para o espaçamento médio no espectro desdobrado, segue que

$$\langle s \rangle = \frac{\sum_{k=1}^{\Delta N-1} s_k}{\Delta N - 1} = \frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1) + (\varepsilon_3 - \varepsilon_2) + \dots + (\varepsilon_{\Delta N} - \varepsilon_{\Delta N-1})}{\Delta N - 1} \approx \frac{\varepsilon_{\Delta N} - \varepsilon_1}{\Delta N} = \frac{\Delta \varepsilon}{\Delta N}. \quad (3.3)$$

Ou seja,

$$\frac{\Delta \varepsilon}{\Delta N} = \frac{f(E + \frac{\Delta E}{2}) - f(E - \frac{\Delta E}{2})}{\Delta N} = \frac{(df/dE)\Delta E}{\Delta N} \approx 1, \quad (3.4)$$

de onde obtemos

$$f(E) = \int_{-\infty}^E \rho(E')dE' \equiv N(E) = \sum_i \Theta(E - E_i). \quad (3.5)$$

Aqui, E_i é o i -ésimo autovalor de energia, Θ é a função de Heaviside e $N(E)$ é chamada de *função*

escada, por razões aparentes. $N(E)$ fornece o número de autovalores com energia menores do que E . Portanto, é uma função que cresce discretamente, em degraus verticais de altura 1 e largura que é uma variável aleatória. O matemático alemão Hermann Weyl propôs pioneiramente uma fórmula que ajusta a função degrau em termos da área A e do perímetro ℓ de um bilhar quântico. A chamada *fórmula de Weyl* é dada por

$$N_{\text{Weyl}}(E) = \frac{A}{4\pi}k^2 - \frac{\ell}{4\pi}k + \text{cte.} \quad (3.6)$$

Para o regime semiclássico, o termo de área, proporcional ao autovalor de energia, domina. Temos aqui todos os ingredientes para o procedimento padrão do desdobramento de um espectro. O algoritmo a ser seguido para um dado sistema é o seguinte: 1. Obtenha um espectro representativo, através de cálculo ou medição, digamos, de E_{N_0} a E_{N_m} . Note que as ordens N_0 e N_m devem ser previamente calculadas ou estimadas. 2. Plote a função $N(E)$ e faça um ajuste linear da mesma (supondo que o regime semiclássico tenha sido atingido), digamos com a função $N_{\text{fit}}(E)$. 3. Substitua o espectro original $\{E_i\}_{i=N_0}^{N_m}$ pelo desdobrado $\{\varepsilon_i\}_{i=N_0}^{N_m} = \{N_{\text{fit}}(E_i)\}_{i=N_0}^{N_m}$.

3.1.2 Distribuição de Espaçamento entre Primeiros Vizinhos

Considere um espectro não degenerado de um sistema completamente integrável. Neste caso, podemos supor que os autovalores de energia são números aleatórios não correlacionados. Estamos interessados na probabilidade $p(s)ds$ de se encontrar dois níveis separados por uma distância no intervalo de s até $s + ds$, ou equivalentemente, de se encontrar um nível dentro da distância ds . Esta probabilidade é proporcional à probabilidade $P_1 = g(s)ds$ de se encontrar *exatamente* um nível no intervalo $[x + s, x + s + ds]$ e à probabilidade P_2 de que não haja nível no intervalo $(x, x + s)$. Esta última é dada por

$$P_2 = 1 - \int_0^s p(s')ds' = \int_s^\infty p(s')ds'. \quad (3.7)$$

Portanto,

$$p(s)ds = P_1 \times \int_s^\infty p(s')ds'. \quad (3.8)$$

Supondo que $g(s)$ é uma distribuição uniforme de números aleatórios, temos que $P_1 = ds$ e, portanto,

$$p(s) = \int_s^\infty p(s')ds'. \quad (3.9)$$

A solução da eq. 3.9, satisfazendo as condições expressas nas Eqs. 3.1 e 3.2 é a distribuição de Poisson

$$p(s) = e^{-s}. \quad (3.10)$$

Este resultado está associado à conjectura de Berry e Tabor (BERRY; TABOR, 1977), que pode ser enunciada como: No regime semiclássico, os autovalores de energia se comportam como uma sequência de variáveis aleatórias independentes, desde que o limite clássico a dinâmica seja completamente integrável. Como mencionado anteriormente, a conjectura de BGS (O. BOHIGAS; SCHMIT, 1984) disparou o interesse pela quantização de sistemas classicamente caóticos em meados da década de 80. A teoria de matriz aleatória em que está baseada teve início bem antes com Wigner, Dyson e outros (MEHTA, 2004). A ideia central está relacionada a experimentos complexos de espalhamento em física nuclear, cuja abordagem teórica envolve o hamiltoniano de um alvo que é desconhecido. Uma abordagem possível para esta dificuldade é truncar o número de elementos da matriz deste hamiltoniano e substituí-los por números aleatórios obedecendo aos critérios de algumas das classes de simetria. Hamiltonianos reais (simetria de reversão temporal (SRT)) seguem o ensemble gaussiano ortogonal, ou GOE, como vimos anteriormente. Hamiltonianos complexos (quebra da SRT) seguem o ensemble unitário (GUE) das matrizes aleatórias. Finalmente, temos o caso específico para sistemas de spins conhecido como ensemble gaussiano simplético (GSE). No que se refere a $p(s)$, a dedução das respectivas fórmulas está acima dos objetivos desse trabalho e podem ser encontradas em livros especializados (MEHTA, 2004). Reproduzimos aqui apenas os resultados para cada ensemble:

$$p(s) = \frac{\pi}{2} s e^{-\frac{1}{4}\pi s^2} \quad (\text{GOE}), \quad (3.11)$$

$$p(s) = \frac{32}{\pi} s^2 e^{-\frac{4}{\pi}s^2} \quad (\text{GUE}), \quad (3.12)$$

e

$$p(s) = \frac{2^{18}}{36\pi^3} s^3 e^{-\frac{64}{9\pi}s^2} \quad (\text{GSE}). \quad (3.13)$$

Das três, apenas a Eq. 3.11 é de nosso interesse nessa dissertação. Diferentemente do caso integrável, as equações 3.11-3.13 prevêm o fenômeno conhecido como *repulsão de níveis*: $p(s=0) = 0$. Em outras palavras, não são esperadas degenerescências em estados altamente excitados de sistemas classicamente caóticos.

3.1.3 Rigidez Espectral

Uma outra propriedade espectral bastante usada é a rigidez espectral, também conhecida como estatística Δ_3 . Ela está associada às correlações de longa distância no espectro. Considere a função escada $N(\varepsilon)$ e a faixa de energia $(\varepsilon; \varepsilon + L)$. $\Delta_3(L)$ é definida como a média no ensemble do ajuste por mínimos quadráticos de $N(\varepsilon)$ no intervalo de tamanho L , o que nos dá a expressão

$$\Delta_3 = \left\langle \min_{m,n} \frac{1}{L} \int_{\varepsilon}^{\varepsilon+L} (N(\varepsilon) - m\varepsilon - n)^2 d\varepsilon \right\rangle. \quad (3.14)$$

No caso integrável se chega a um resultado analítico $\Delta_3(L) = L/15$, enquanto que pra sistemas caóticos, seguindo a conjectura de BGS, o resultado para GOE é dado por (MEHTA, 2004)

$$\Delta_3(L) = \frac{L}{15} - \frac{1}{15L^4} \int_0^L (L - \varepsilon)^3 (2L^2 - 9L\varepsilon - 3\varepsilon^3) Y_2(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (3.15)$$

onde $Y_2(E)$ é a função de correlação de dois pontos

$$Y_2(r) = \left[\frac{\sin(\pi r)}{\pi r} \right]^2 + \left[\frac{\pi}{2} \operatorname{sgn}(r) - \operatorname{si}(\pi r) \right] \left[\frac{\cos(\pi r)}{\pi r} - \frac{\sin(\pi r)}{(\pi r)^2} \right], \quad (3.16)$$

Onde $\operatorname{sgn}(r)$ é a função sinal e $\operatorname{si}(r)$ é a função seno integral, definida por

$$\operatorname{si}(r) = \int_0^r \frac{\sin(x)}{x} dx. \quad (3.17)$$

A Fig. (3.1) mostra os gráficos de $\Delta_3(L)$ para os dois limites integrável (Poisson) e caótico (GOE).

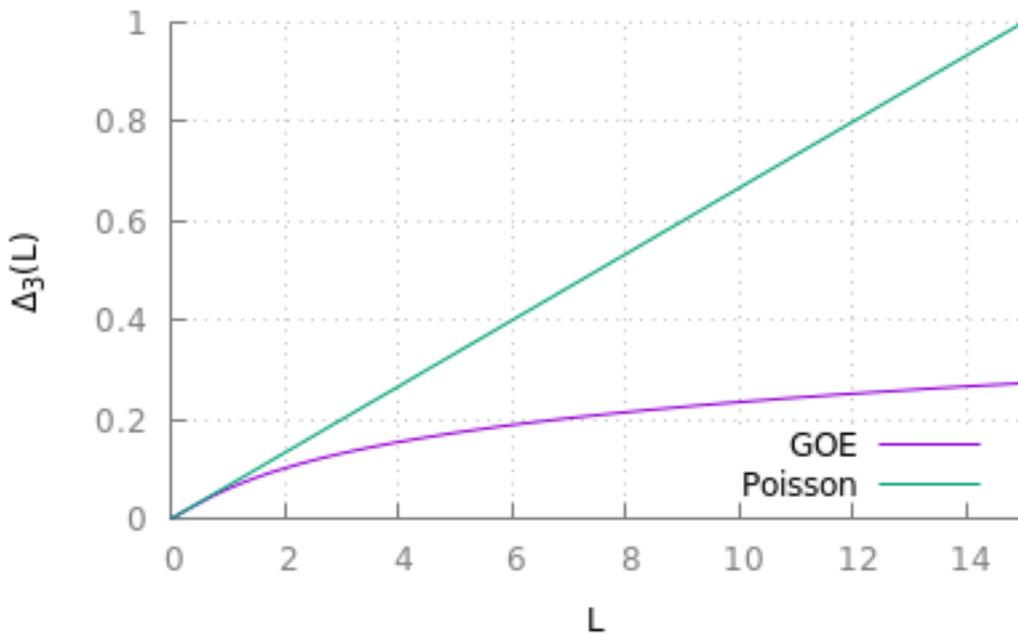


Figura 3.1: Rigidez Espectral para os casos integrável (Poisson) e caótico (GOE).

3.1.4 Estatística δ_n e o Ruído $1/f^\alpha$

Uma outra abordagem para o Caos Quântico baseada em métodos clássicos da análise de séries temporais foi proposta em (RELAÑO et al., 2002). A ideia aqui é tratar o espectro do sistema como um sinal de uma série temporal discreta. Embora não haja explicação formal, uma característica muito frequente em sistemas complexos é a presença de um ruído do tipo $1/f^\alpha$ na flutuação de variáveis que descrevem o sistema, o que quer dizer que o espectro de potências de Fourier $S(f)$ se comporta como $1/f^\alpha$ em termos da frequência f . Essa ideia foi aplicada a sistemas caóticos quânticos e obteve-se que o espectro de energias apresenta flutuações do tipo $1/f$ (RELAÑO et al., 2002). Em adição, se encontrou que quando o sistema possui espaço de fase misto, o expoente α se encontrava no intervalo $(1;2)$, possuindo expoente $\alpha \rightarrow 2$ para o caso integrável (GÓMEZ et al., 2005).

O ponto de partida para caracterizar a flutuação espectral nesse caso é a chamada estatística δ_n , definida por

$$\delta_n = \sum_{i=1}^n (s_i - \langle s \rangle). \quad (3.18)$$

δ_n mede a flutuação do i -ésimo espaçamento em relação ao espaçamento médio $\langle s \rangle$. Formalmente, é possível fazer uma analogia entre δ_n e uma série temporal correspondendo ao deslocamento de uma partícula, considerando que cada n representa um passo de tempo discreto. A transformada de Fourier de δ_n é

$$\delta_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N \delta_n \exp\left(-i \frac{2\pi k}{N} n\right), \quad (3.19)$$

onde $2\pi k/N$ é a frequência fundamental da série e N é o tamanho da mesma. O espectro de potência é dado por

$$S(k) = |\hat{\delta}_k|^2. \quad (3.20)$$

Para eliminar flutuações estatísticas e caracterizar de maneira mais eficiente as propriedades indesejadas de δ_n , são calculadas médias no ensemble de $S(k)$. Então os dados obtidos são modelados pela dependência funcional,

$$\langle S(k) \rangle \sim \frac{1}{k^\alpha}, \quad (3.21)$$

de onde podemos extrair o valor do expoente α que caracteriza o sistema.

Nas seções seguintes aplicaremos o aparato numérico discutido no Capítulo 2 para o cálculo das estatísticas $p(s)$, $\Delta_3(L)$ e $\langle S(k) \rangle \sim \frac{1}{k^\alpha}$. As figuras 3.2, 3.3 e 3.4 representam os resultados para o retângulo usado no capítulo anterior para testar o método.

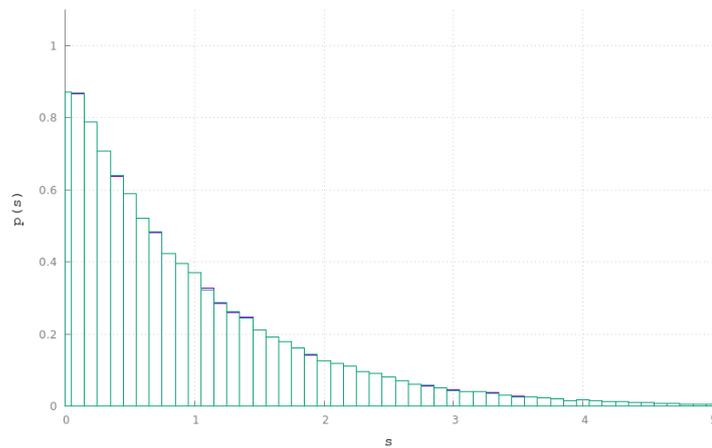


Figura 3.2: Plot Comparativo de $p(s)$ obtido com os primeiros 145000 autovalores de energia acima dos primeiros 5000 autovalores, para o espectro exato (roxo), e para o espectro obtido pelo método de Vergini e Saraceno (verde).

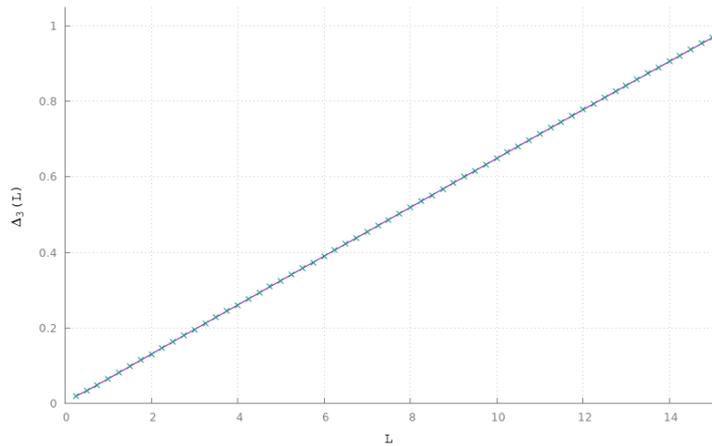


Figura 3.3: Plot Comparativo da estatística $\Delta_3(L)$ obtido com os primeiros 145000 autovalores de energia acima dos primeiros 5000 autovalores, para o espectro exato (linha sólida), e para o espectro obtido pelo método de Vergini e Saraceno (pontos).

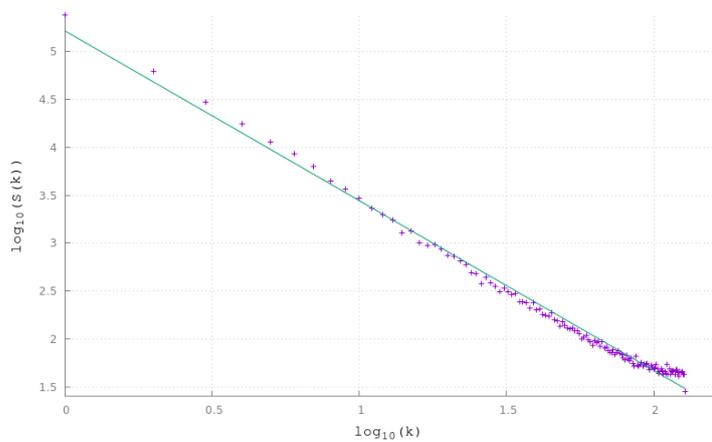


Figura 3.4: Plot comparativo da série de potência da estatística $\delta_n, S(k)$, obtida a partir das últimas 400 séries de 256 autovalores do espectro de 150000 autovalores obtido com a rotina de Vergine e Saraceno (pontos), e do fit-linear dos dados (linha sólida). $\alpha = -1.78$ obtido.

3.2 Estádio Elíptico

Em seu trabalho (BUNIMOVICH, 1979), Bunimovich apresenta as propriedades ergódicas presentes nos espaços de fase de bilhares de vários formatos. Um dos formatos mais populares é o estádio. Composto por dois semi-círculos (região focalizadora) unidos por uma região retangular (região neutra) figura 3.5. Os dois parâmetros que controlam as dimensões do bilhar são o raio a dos semi-círculos e um dos lados do retângulo t (o outro lado mede $2a$). Como descrito em (LIMA, 2018), para $a = 1$, qualquer valor de $t > 0$ produz um comportamento sempre caótico para o estádio.

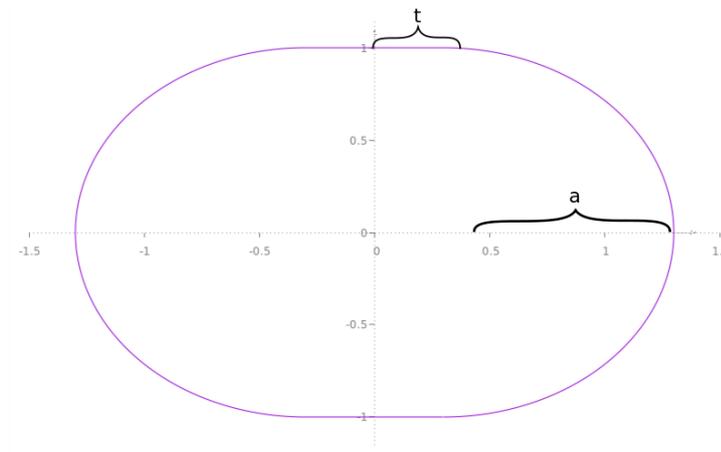


Figura 3.5: Quando $a = 1$, temos o estádio circular de Bunimovich, quando $a \neq 1$, temos o estádio elíptico.

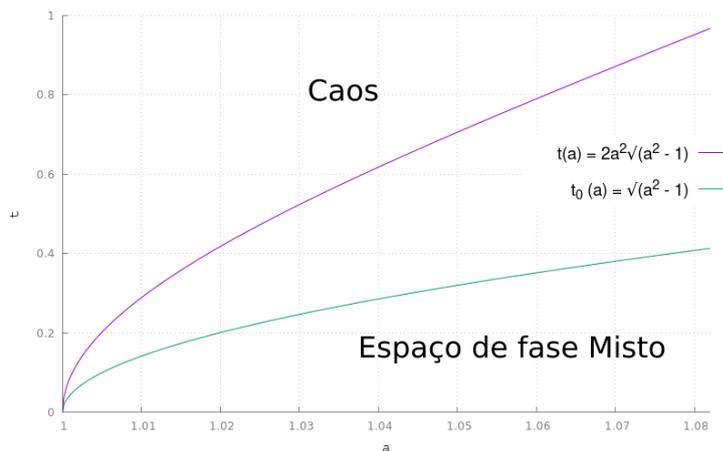


Figura 3.6: Limites no espaço de parâmetros dos comportamentos conhecidos para o estádio elíptico.

Por apresentar comportamento regular, caótico ou misto a depender dos valores de a e t , uma variação comumente estudada é o Estádio Elíptico. Nele mantemos o semi-eixo fixo na direção y , $b = 1$, enquanto o semi-eixo na direção x varia, $a \neq 1$. Como apresentado em (LIMA, 2018), é garantido analiticamente o comportamento caótico do estádio elíptico para

uma pequena faixa de parâmetros, se $1 < a < \sqrt{4 - \sqrt{8}} \sim 1.082$, e $t > 2a^2\sqrt{a^2 - 1}$. Por outro lado é conjecturado um limite inferior para o comportamento caótico em (CANALE et al., 1998) a partir do estudo da estabilidade de órbitas periódicas do estádio, com período $T(i) = 4 + 2i$, com 4 colisões nas regiões focalizadoras do bilhar e i colisões na região neutra. Essas órbitas são chamadas de órbitas pantográficas. Esse limite inferior seria dado pela curva $t = H(a)$, onde $H(a)$ é a curva formada pelo limite superior de uma família de curvas $t_i(a)$ com $i = 1, 2, 3, \dots$, que representariam o limiar onde a órbita pantográfica de ordem i perde a estabilidade. A primeira curva dessa família é a curva $t_0(a) = \sqrt{a^2 - 1}$ que está ilustrada na figura 3.6. É importante destacar que para a região entre as duas curvas o comportamento do sistema continua desconhecido. Para $a = 1.04$ somente t_0 é relevante, por esse motivo escolhemos obter os espectros para esse valor de parâmetro.

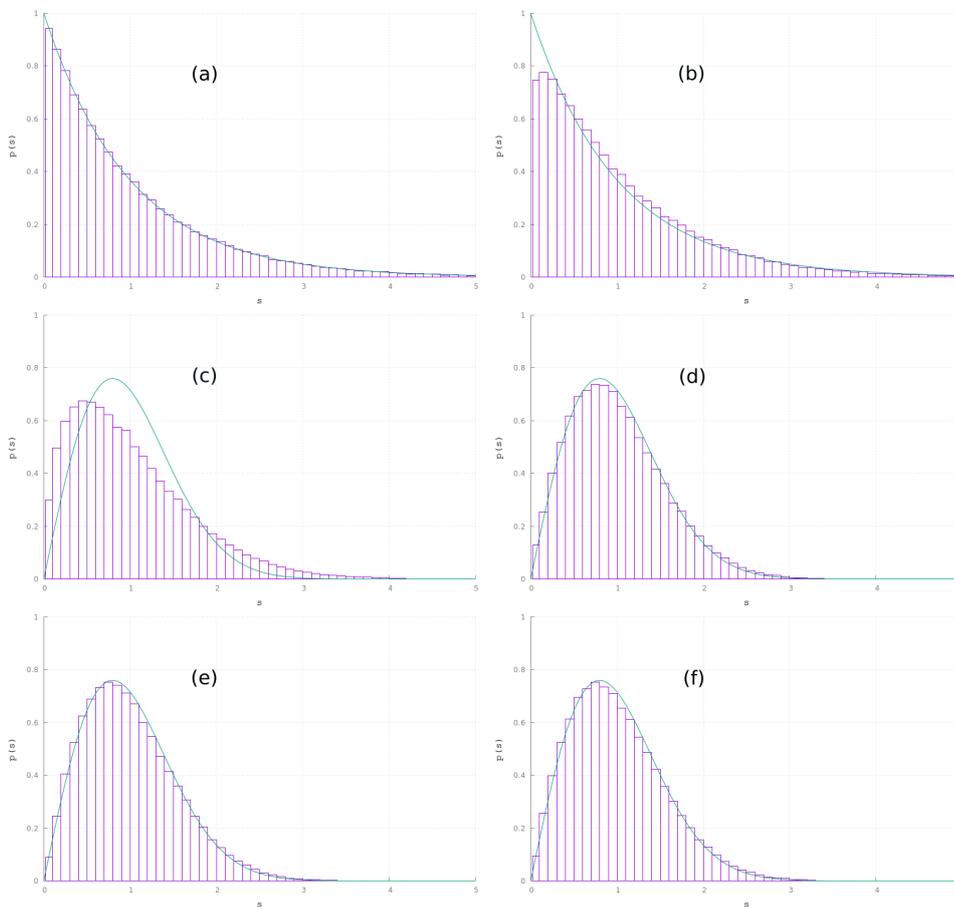


Figura 3.7: Histograma representa $p(s)$ obtido para $a = 1.04$ e $t =$ (a) 0.0, (b) 0.01, (c) 0.05, (d) 0.15, (e) 0.286, (f) 0.67, curva cheia representa $p(s)$ para a distribuição de Poisson((a), (b)) e GOE ((c), (d), (e), (f)).

Os espectro obtido com a rotina em C++ foi utilizado para as análises apresentadas. Foram utilizados os 145000 autovalores acima dos primeiros 5000. Então o espectro foi desdobrado, e se fez a distribuição do espaçamento de primeiros vizinhos $p(s)$. Resultados obtidos estão mostrados na figura 3.7. O mesmo foi feito para a Rigidez Espectral, $\Delta_3(L)$, e os resultado comparativos para os valores dos parâmetros (t, a) são apresentados na figura 3.8. A série

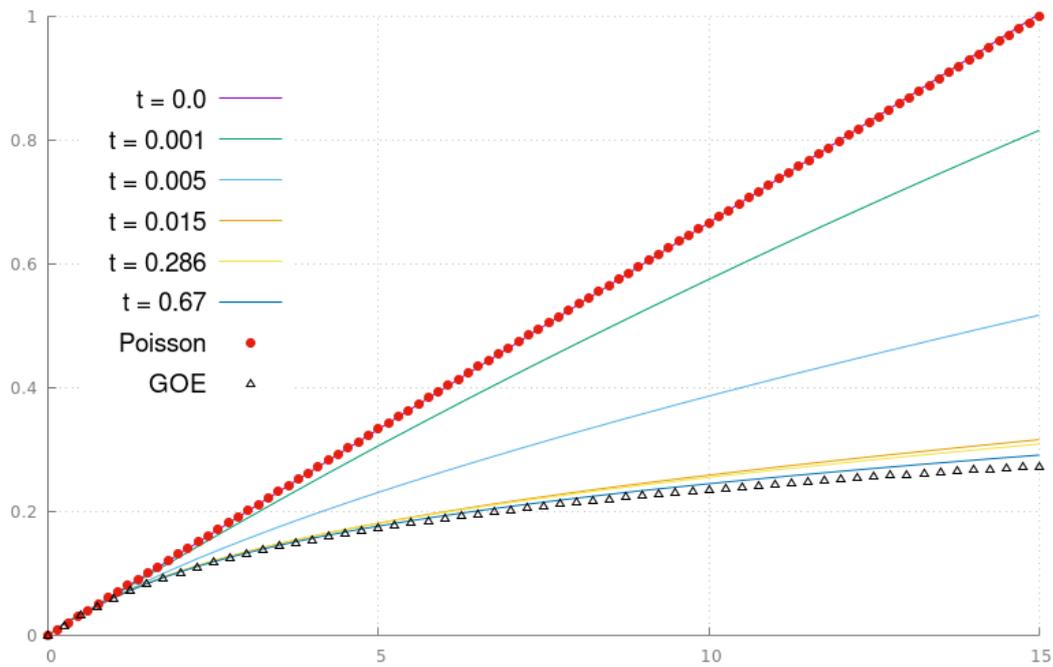


Figura 3.8: Valores de $\Delta_3(L)$ para $a = 1.04$ e t como no gráfico.

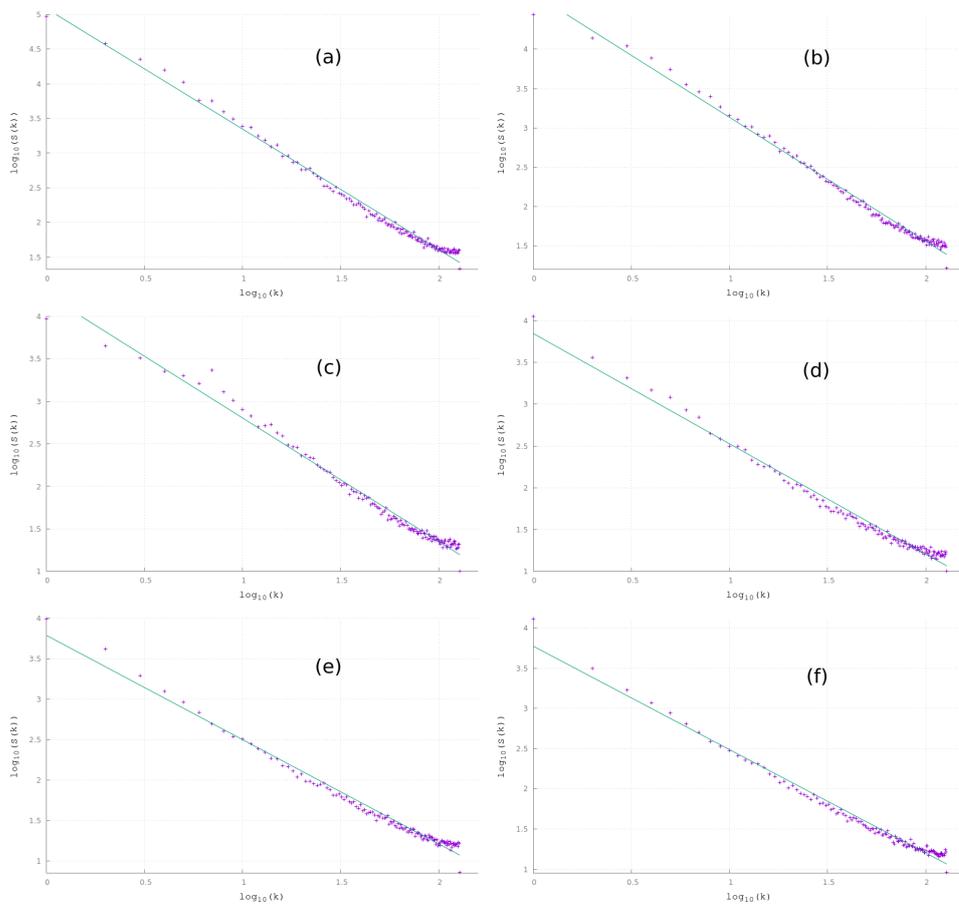


Figura 3.9: Ajuste linear para $\log(S(k))$ vs $\log(k)$ e os valores obtidos para o expoente α para (a) $t = 0.0$, $\alpha = -1.80$, (b) $t = 0.01$, $\alpha = -1.57$, (c) $t = 0.05$, $\alpha = -1.45$, (d) $t = 0.15$, $\alpha = -1.32$, (e) $t = 0.286$, $\alpha = -1.29$, (f) $t = 0.67$, $\alpha = -1.28$

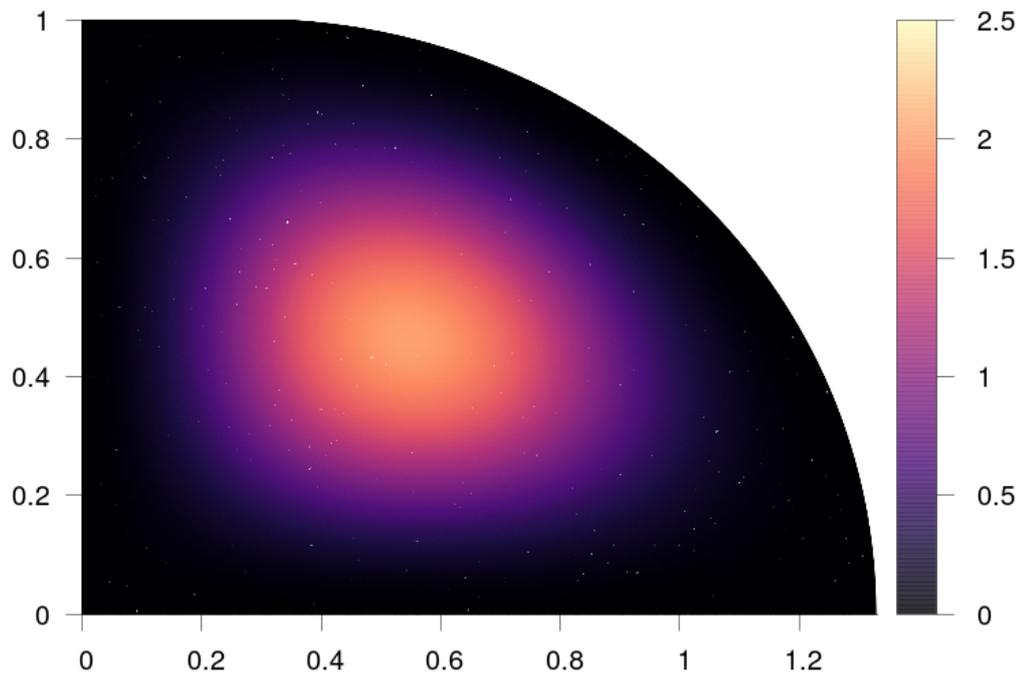


Figura 3.10: Estado fundamental com $k = 4.341017$

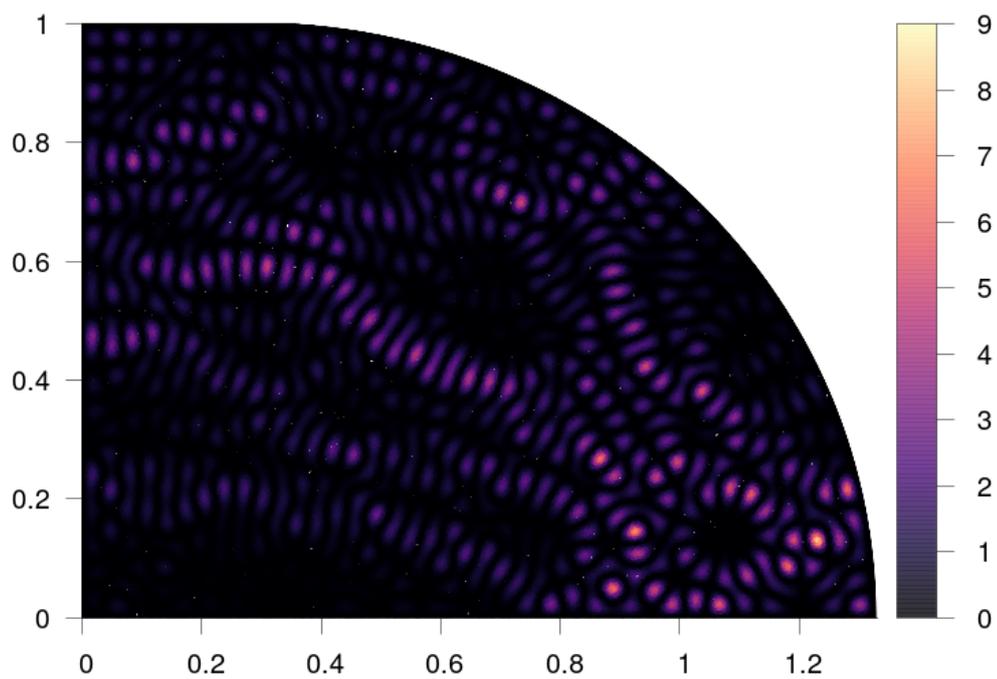


Figura 3.11: 851º estado excitado com $k = 100.6338$

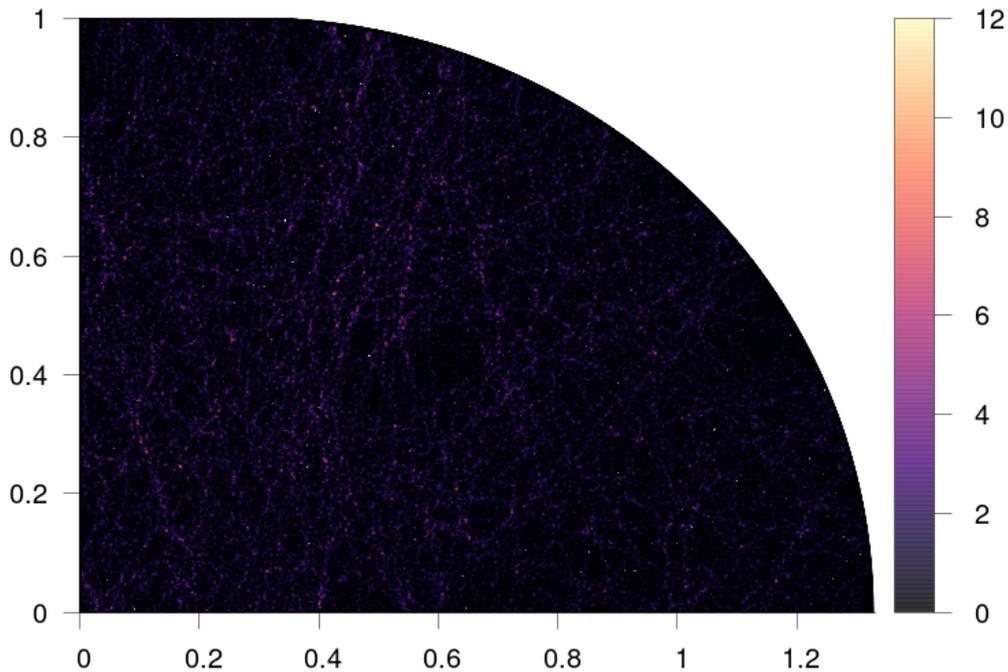


Figura 3.12: 87120° estado excitado com $k = 1000.018$

de potência para a estatística δ_n , $S(k)$ é apresentada na figura 3.9. Algumas funções de onda representativas são apresentadas nas figuras 3.10, 3.11, 3.12.

3.3 Triângulos Irracionais

É conhecido da literatura matemática que bilhares em polígonos não podem ser caóticos, mas podem ser misturantes (GUTKIN, 1986). De fato, polígonos com todos os ângulos internos racionais com π , chamados de polígonos racionais, não são nem ergódicos. Por outro lado, polígonos cujos ângulos internos são irracionais com π , chamados de polígonos irracionais, podem possuir comportamentos fracamente e fortemente misturantes. Uma das classes de bilhares poligonais que ganhou evidência após o trabalho (CASATI; PROSEN, 1999) é a dos Bilhares Triangulares Irracionais (BTI), triângulos onde todos os ângulos internos são irracionais com π . No trabalho de Casati-Prosen foram mostradas evidências numéricas de propriedades fortemente misturantes para a classe dos BTI e então foi feita sugestão pelos autores de que BTI gerais deveriam ter propriedades fortemente misturantes. Em (AGUIAR, 2008) são apresentadas evidências de que embora o comportamento misturante seja observado para alguns casos de BTI isso não é verdade no geral.

Dentro da classe dos BTI, uma família em particular foi utilizada para nossas investigações. Como apresentado em (LIMA; RODRÍGUEZ-PÉREZ; AGUIAR, 2013) a família a um parâmetro de triângulos formada por triângulos cujos lados são inteiros consecutivos $N, N+1, N+2$ são ergódicos para $3 < N < \infty$, e as estatísticas $p(s)$, $\Delta_3(L)$ e δ_n tendem às

apresentadas pela teoria das matrizes aleatórias para o GOE quando $N = 7$ e $N = 8$. Os resultados obtidos para a distribuição do espaçamento de primeiros vizinhos é mostrado nas figuras 3.13 e 3.14 para os triângulos com $N = 7, 8$ respectivamente. Um plot comparativo mostrando $\Delta_3(L)$ para as distribuições de Poisson, GOE, e os resultados obtidos para ambos os triângulos é mostrado em 3.15.

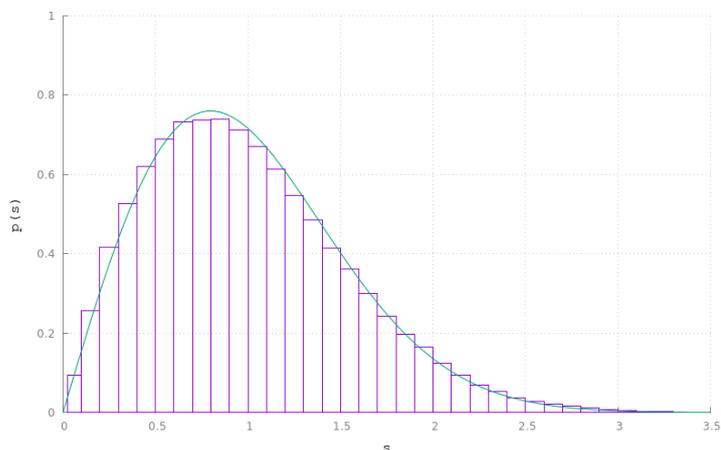


Figura 3.13: Histograma representando $p(s)$ para o caso $N = 7$ obtido pela rotina computacional, e distribuição para GOE representada pela linha sólida.



Figura 3.14: Histograma representando $p(s)$ para o caso $N = 8$ obtido pela rotina computacional, e distribuição para GOE representada pela linha sólida.

Foi observado ainda a presença de ruído tipo $\sim 1/f^\alpha$, figura 3.16, tendo valores de α próximos de 1, para ambos os casos apresentados. Embora nunca classicamente caóticos, esses triângulos apresentam características fortemente misturantes, mostrando evidências de que essas caracterizações estatísticas, usadas na comunidade como medidas para a caoticidade quântica dos sistemas, quando se aproximam das previstas para GOE; na verdade estariam associadas de maneira mais geral a sistemas misturantes no seu limite clássico. Como no caso do estádio elíptico, os resultados foram obtidos para os primeiros 145000 autovalores acima dos primeiros 5000. Algumas funções de onda representativas são apresentadas nas figuras 3.17, 3.18, 3.19.

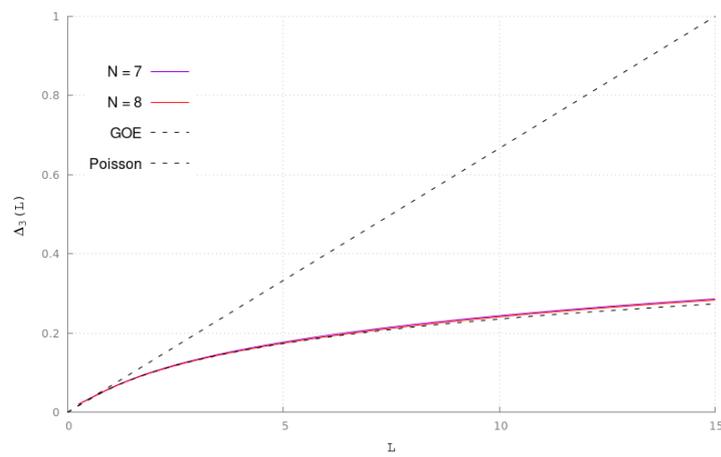


Figura 3.15: Δ_3 obtido para os triângulos $N = 7$ e $N = 8$ (linhas sólidas), comparados com as previsões para Poisson e GOE (linhas tracejadas).

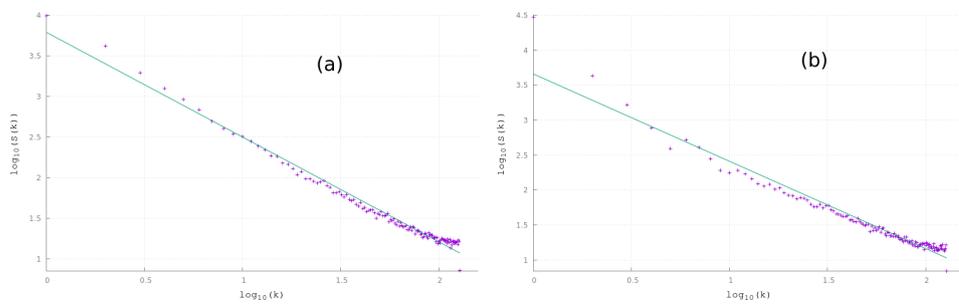


Figura 3.16: $\log(S(k))$ vs $\log(k)$ e ajuste obtido para triângulos (a) $N = 7$, $\alpha = -1.12$ e (b) $N = 8$, $\alpha = -1.12$.

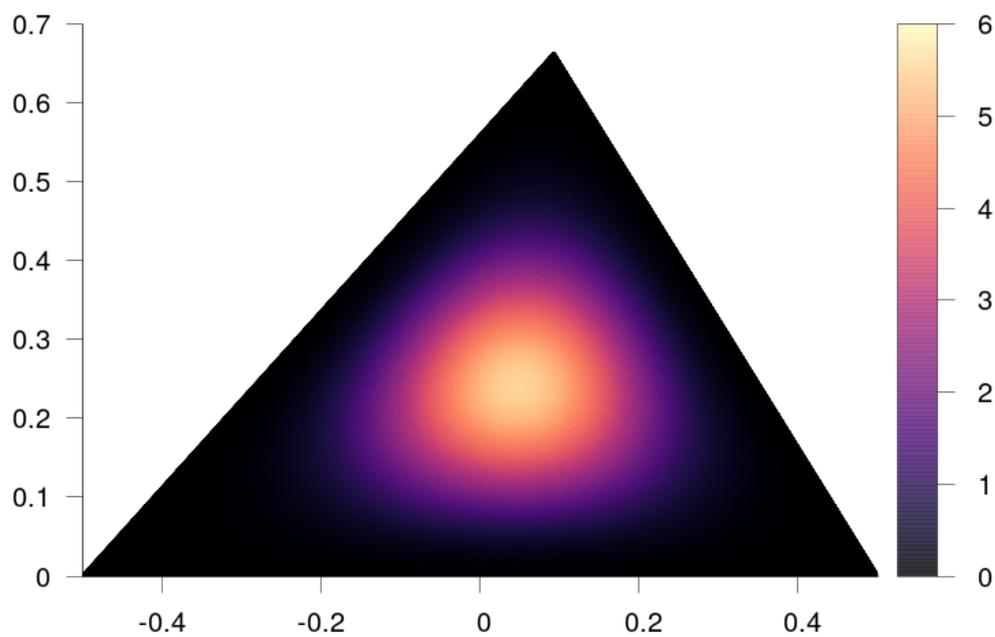


Figura 3.17: Estado fundamental com $k = 8.387721$ para $N = 7$

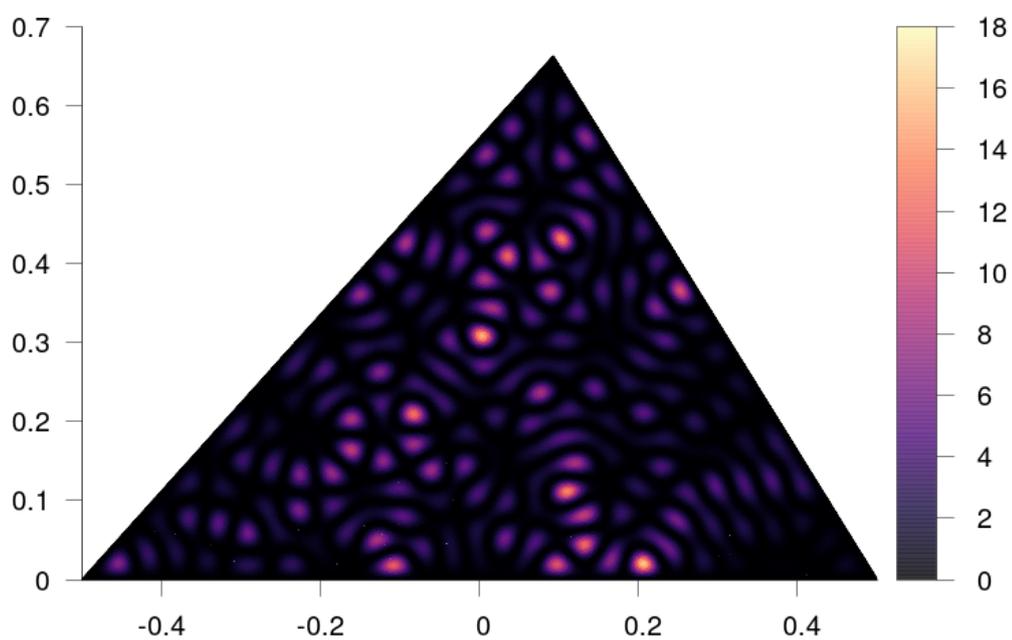


Figura 3.18: 252° estado excitado com $k = 101.6873$ para $N = 7$

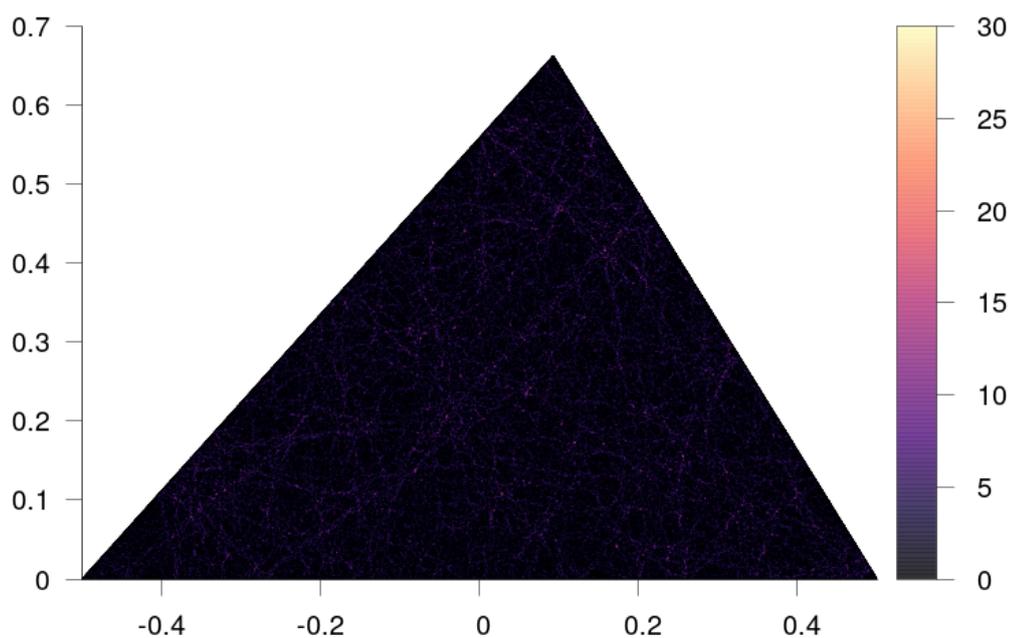


Figura 3.19: 104996° estado excitado com $k = 2000.095$ para $N = 7$

3.4 Conclusões e Perspectivas

A implementação do método de Vergini e Saraceno nos fornece bons resultados como pode ser observado através dos espectros do estádio elíptico que puderam ser usados para o cálculo de $p(s)$, $\Delta_3(L)$ e apresentaram boa concordância com as previsões originárias da teoria das matrizes aleatórias para o caso integrável ($t = 0$) e para o caso caótico ($t = 0.67$). Para os casos com espaço de fase misto, $p(s)$ e $\Delta_3(L)$ apresentam comportamentos intermediários entre Poisson e GOE. A análise da série de potências para δ_n , $S(k)$ nos mostrou a presença de uma dependência do tipo $1/f^\alpha$ com $\alpha = 1.80$ pra o caso integrável e $\alpha = 1.28$ no caso caótico, demonstrando boa concordância com a conjectura advogada em (GÓMEZ et al., 2005). Por outro lado, para a família de triângulos irracionais estudada, os espectros obtidos nos permitiram observar além da boa concordância de $p(s)$ e $\Delta_3(L)$ com o resultado da teoria das matrizes aleatórias, a dependência do expoente da série de potências $S(k)$ com o comportamento fortemente misturante do sistema para os casos $N = 7$ e $N = 8$ como apresentado em (LIMA; RODRÍGUEZ-PÉREZ; AGUIAR, 2013). Assim, uma vez que os triângulos dessa família não podem nunca ser classicamente caóticos, fomos levados a levantar a hipótese de que de fato a concordância com os resultados previstos na teoria das matrizes aleatórias do GOE seria suficiente apenas para prever comportamentos misturantes, e não necessariamente caóticos como é costumeiramente apresentado na comunidade.

A alta velocidade e eficiência em encontrar autovalores e autofunções para bilhares do método de Vergini e Saraceno facilita a investigação numérica das caracterizações estatísticas comumente utilizadas como qualificadores para a quantização de sistemas classicamente caóticos. Na realidade um método como esse, que consegue fornecer autovalores mais próximos do limite semiclássicos e em quantidades até 2 ordens de grandeza maiores que o de qualquer método conhecido até hoje, fornece meios para averiguação das conjecturas sobre as correlações espectrais em um novo patamar de confiabilidade, uma vez que na prática os testes comumente apresentados possuem de algumas centenas a poucos milhares de autovalores e valores muito distantes das regiões semi-clássicas devido a limitações computacionais de métodos como de elementos finitos ou limitações experimentais devido às condutâncias finitas das cavidades.

Por outro lado, embora não se conheça fundamentalmente nenhuma limitação à aplicabilidade do método devido a algum formato específico de fronteira para o bilhar, na prática, uma maneira geral de escolha de distribuição espacial das ondas planas que compõem a base computacional de modo a obter as melhores resoluções na construção do funcional tensão $F(k)$ e de $dF(k)/dk$, além de técnicas gerais para a adição de ondas evanescentes à base de modo a melhorar a acurácia, ainda são desconhecidas. Deste modo, investigações sobre essas questões do método se fazem necessárias.

Referências

- AGUIAR, F. M. de. Quantum Properties of Irrational Triangular Billiards. **PRE**, [S.l.], v.77, p.062902/1–062902/7, 2008.
- ARFKEN, G. B. **Mathematical methods for physicists**. EUA: Academic Press, 1985.
- BARNETT, A. **PHD Thesis Alex Barnett**: dissipation in deforming chaotic billiards. Cambridge, Massachusets: University of Harvard, 2000.
- BEENAKKER, C. W. J. Randon-matrix Theory of Quantum Transport. **Rev. Mod. Phys.**, [S.l.], v.69, p.731–808, 1997.
- BERRY, M. V. **The Wave-Particle Dualism/Structures in Semiclassical Spectra**: a question of scale. [S.l.]: Springer, 1984. 231-252p.
- BERRY, M. V.; TABOR, M. Level Clustering in the Regular Spectrum. **Proc. R. Soc. London**, [S.l.], v.A 356, p.375–394, 1977.
- BUNIMOVICH, L. A. On the Ergodic Properties fo Nowhere Dispersing Billiards. **Communications in Mathematical Physics**, [S.l.], v.65, p.295–312, 1979.
- CANALE, E. et al. A lower bound for chaos on the elliptical stadium. **Physica D**, [S.l.], v.115, 1998.
- CASATI, G.; PROSEN, T. Mixing Property of Triangular Billiards. **Physical Review Letters**, [S.l.], v.83, December 1999.
- CHERNOV, N.; MARKARIAN, R. **Chaotic Billiards**. EUA: American Mathematical Society, 2006.
- COHEN-TANNOUJJI; DIU, B.; LALOE, F. **Quantum Mechanics**. 1st.ed. [S.l.]: Wiley, 1991.
- DIETZ, B.; RICHTER, A. Quantum and Wave Dynamical Chaos in Superconducting Microwave Billiards. **Chaos**, [S.l.], v.25, p.097601/1–097601/17, 2015.
- DIETZ, B.; SMILANSKY, U. **Chaos**, [S.l.], v.3, p.581, 1993.
- GUTKIN, E. **Physica D**, [S.l.], v.19, p.311–336, 1986.
- GÓMEZ, J. M. G. et al. $1/f^\alpha$ Noise in Spectral Fluctuations of Quantum Systems. **Phys. Rev. Lett.**, [S.l.], v.94, p.084101/1–084101/4, 2005.
- GÓMEZ, J. M. G. et al. $1/f^\alpha$ Noise in Spectral Fluctuations of Quantum Systems. **Physical Review Letters**, [S.l.], v.94, March 2005.
- HELLER, E. J. **Semiclassical Wave packet Dynamics and Chaos in Quantum Mechanics**. North-Holand: Elsevier Science Publishers B.V., 1991.
- LIMA, T. A. **BILHARES TRIANGULARES IRRACIONAIS E ESTÁDIOS ELÍPTICOS**: mixing, caos e quantizaÇÃo, tese de doutorado. Recife, Brasil: Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco, 2018.

- LIMA, T. A.; AGUIAR, F. M. de. Classical Billiards and Quantum Fluids. **Physical Review E**, [S.l.], v.91, January 2015.
- LIMA, T. A.; RODRÍGUEZ-PÉREZ, S.; AGUIAR, F. M. de. Ergodicity and quantum correlations in irrational triangular billiards. **Physical Review E**, [S.l.], v.87, June 2013.
- LIMA, T. A.; TERTO, K.; AGUIAR, F. M. de. $1/f^\alpha$ noise in spectral fluctuations of nonchaotic quantum billiards. **Manuscrito em Preparação**, [S.l.], 2018.
- MEHTA, M. L. **Random Matrices**. 3rd.ed. [S.l.]: Elsevier Academic Press, 2004.
- MENEZES, D. D. de; JAR, M.; AGUIAR, F. M. de. Numerical Experiments on Quantum Chaotic Billiards. **Chaos**, [S.l.], v.17, p.023116/1–023116/9, 2007.
- O. BOHIGAS, M. J. G.; SCHMIT, C. Characterization of Chaotic Quantum Spectra and Universality of Level Fluctuation Laws. **Phys. Rev. Letters**, [S.l.], v.52, January 1984.
- RELAÑO, A. et al. Quantum Chaos and $1/f$ Noise. **Physical Review Letters**, [S.l.], v.89, December 2002.
- SANDERSON, C.; CURTIN, R. Armadillo: a template-based c++ library for linear algebra. **Journal of Open Source Software**, [S.l.], v.1, p.26–33, 2016.
- SANDERSON, C.; CURTIN, R. A User-Friendly Hybrid Sparse Matrix Class in C++. **Lecture Notes in Computer Science**, [S.l.], v.10931, p.422–430, 2018.
- STÖCKMANN, H.-J.; STEIN, J. "Quantum" Chaos in Billiards Studied by Microwave Absorption. **Physical Review Letters**, [S.l.], v.64, p.2215–2218, 1990.
- TERTO, K. et al. Continuous variables quantum computation over the vibrational modes of a single trapped ion. **Optics Communications**, [S.l.], v.397, p.166–174, 2017.
- VERGINI, E. **Estudio Cuántico y Semiclásico de Billares Clásicamente Caóticos, PHD Thesis E. Vergini**. Buenos Aires, Argentina: Universidad de Buenos Aires, 1994.
- VERGINI, E.; SARACENO, M. **Phys. Rev. E**, [S.l.], v.52, p.2204–2207, 1995.
- WEIDENMÜLLER, H. A.; MITCHELL, G. E. Classical Billiards and Quantum Fluids. **Rev. Mod. Phys.**, [S.l.], v.81, p.539–598, 2009.

Apêndice

.1 Rotina Implementada para o método de Vergini e Saraceno

A rotina aqui apresentada recebe um arquivo de entrada. A primeira linha do arquivo contém o perímetro do bilhar. Da segunda linha em diante existem 5 colunas. A primeira e a segunda colunas são as componentes x e y dos pontos que discretizam a fronteira do bilhar, a terceira coluna apresenta $rn = \vec{r} \cdot \hat{n}$, e a quarta e quinta colunas contém as componentes n_x e n_y do campo normal unitário \hat{n} . Como saída o programa devolve um arquivo contendo os primeiros autovalores encontrados começando pelo valor da variável k e em quantidade definida pela variável *numeros_onda* encontrados, em ordem crescente. Caso se queria plotar um dado estado a variável *plot* deve ser setada em 1, e um mesh do bilhar deve ser fornecido ao programa pra que se faça o cálculo da função de onda sendo devolvido um outro arquivo com 3 colunas. A primeira e a segunda colunas são as coordenadas (x_i, y_i) dos pontos do mesh e a terceira o valor de $|\psi(x_i, y_i)|^2$ normalizada.

```
#include <iostream>
#include <armadillo>
#include <cmath>
#include <fstream>
#include <vector>
#include <string>
#include <sstream>

using namespace std;
using namespace arma;

//carrega o bilhar presente em bilhares/
//opcoes 1- bunimovich_a-104_t-0286; 2 - triangulo_N-7;
3 - triangulo_circ_L-125_R-0125; 4 - hexagono_N-7;
5 - retangulo_a-pis3_b-1; 6 - retangulo_a-41s29_b-1;
7 - triangulo_N-8

//opcoes para a base: 1 - sin * sin (ímpar ímpar);
2 - sin * cos e sin * sin

struct func_de_onda{
int trunc_base, n;
double k, tensao;
vec componentes;
```

```
string nome;
};

double perimetro, k = 8, dk = 0.1 , evtol = 5E-17, n = 0;
int num_pontos, N, numeros_onda = 150000, funcao_onda_i = 1,
int opcao_base = 1;
bool plot = 0;
mat F, dF, G, H;
string Bilhar("triangulo_N-7"), fim(".txt");
//mat T, translacao;
vector<double> u, v, Sx, Sy, x, y, rn, nx, ny, v1, v2, v3,
vector<double> A, B, C, D, E, eFi, c1, c2, c3, c4, c5, c6;
vec eigval, eigval_efetivo, c_ef, c, autovalores;
mat eigvec, eigvec_efetivo;
ofstream Energias;
ifstream bilhar, arquivo;
string filename;
ostringstream ki, kf;

vector<func_de_onda> estados;

string nomeia(string oque){
    string NOME;
    int caso = 0;
    if(oque == "ks") {caso = 0;}
    if(oque == "wf") {caso = 1;}
    if(oque == "fronteira") {caso = 2;}
    if(oque == "mesh") {caso = 3;}
    switch(caso){
        case 0://nomeio o arquivo
            NOME = "Ks/" + Bilhar + "_ki-" + to_string(k) + "_"
            + "n-" + to_string(numeros_onda) + "_new" + fim;
        break;
        case 1:
            NOME = "wave_functions/" + Bilhar + "_ki-" +
            to_string(k) + "_estado-" + to_string(funcao_onda_i) +
            "_new" + fim;
        break;
        case 2:
```

```
NOME = "bilhares/" + Bilhar + fim;
break;
case 3:
NOME = "bilhares/" + Bilhar + "_mesh" + fim;
break;
}
return (NOME);
}

double modulo(double x){
if(x >= 0) return x;
else return -1*x;
}

void carrega_frenteira(){
bilhar.open(nomeia("frenteira"));
cout << nomeia("frenteira") << endl;
double leitura;

bilhar >> perimetro;
cout << "perimetro : " << perimetro << endl;

while(true){
bilhar >> leitura; //lê coordenada x
if( bilhar.eof() ) break;
x.push_back(leitura);
bilhar >> leitura; //lê coordenada y
if( bilhar.eof() ) break;
y.push_back(leitura);
bilhar >> leitura; //lê coordenada rn
if( bilhar.eof() ) break;
rn.push_back(leitura);
bilhar >> leitura; //lê coordenada nx
if( bilhar.eof() ) break;
nx.push_back(leitura);
bilhar >> leitura; //lê coordenada ny
if( bilhar.eof() ) break;
ny.push_back(leitura);
}
```

```
num_pontos = x.size();

bilhar.close();
}

void preenche_espaco(){
arquivo.open(nomeia("mesh"));
cout << nomeia("mesh") << endl;
double leitura;

//cout << "aqui" << endl;
//arquivo.seekg(1, ios::beg);

if( arquivo.is_open() ){
while( !arquivo.eof() )
{
arquivo >> leitura;
//cout << leitura << endl;
Sx.push_back(leitura);
//arquivo.seekg(1, ios::cur);
arquivo >> leitura;
Sy.push_back(leitura);
//arquivo.seekg(1, ios::cur);
}
}
//cout << "\n ali";
arquivo.close();
}

void atualiza_N(){
    N = (int)(0.9*k + 20 + 0.5);
}

double teta(int i){
    return((M_PI/(8*(double)(N)))*((double)(i) - 1/2)
    *(5 - (double)(i)/(double)(N)));
}
```

```
double phi(double K, double X, double Y, int i){
    //base impar impar
    if(opcao_base == 1){
        return (sin(X*K*cos(teta(i + 1)))*sin(Y*K*sin(teta(i + 1))));
    }
    //base impar par
    if(opcao_base == 2){
        if(i%2 == 1){
            return (sin(X*K*cos(teta(i + 1)))*sin(Y*K*sin(teta(i + 1))));
        }
        else{
            return (cos(X*K*cos(teta(i + 1)))*sin(Y*K*sin(teta(i + 1))));
        }
    }
}
```

```
double rpDphi(double K, double X, double Y, int i){
    if(opcao_base == 1){
        return(X*K*cos(teta(i + 1))*cos(X*K*cos(teta(i + 1)))
        *sin(Y*K*sin(teta(i + 1))) + Y*K*sin(teta(i + 1))*
        sin(X*K*cos(teta(i + 1)))*cos(Y*K*sin(teta(i + 1))));
    }
    //
    if(opcao_base == 2){
        if(i%2 == 1){
            return(X*K*cos(teta(i + 1))*cos(X*K*cos(teta(i + 1)))
            *sin(Y*K*sin(teta(i + 1))) + Y*K*sin(teta(i + 1))*
            sin(X*K*cos(teta(i + 1)))*cos(Y*K*sin(teta(i + 1))));
        }
        else{
            return(-X*K*cos(teta(i + 1))*sin(X*K*cos(teta(i + 1)))
            *sin(Y*K*sin(teta(i + 1))) + Y*K*sin(teta(i + 1))
            *cos(X*K*cos(teta(i + 1)))*cos(Y*K*sin(teta(i + 1))));
        }
    }
}
```

```
double npDphi(double K, double X, double Y, double NX,
double NY ,int i){
```

```
if (opcao_base == 1){
    return(NX*K*cos(teta(i + 1))*cos(X*K*cos(teta(i + 1)))
    *sin(Y*K*sin(teta(i + 1))) + NY*K*sin(teta(i + 1))
    *sin(X*K*cos(teta(i + 1)))*cos(Y*K*sin(teta(i + 1))));
}
//
if (opcao_base == 2){
    if(i%2 == 1){
        return(NX*K*cos(teta(i + 1))*cos(X*K*cos(teta(i + 1)))
        *sin(Y*K*sin(teta(i + 1))) + NY*K*sin(teta(i + 1))
        *sin(X*K*cos(teta(i + 1)))*cos(Y*K*sin(teta(i + 1))));
    }
    else{
        return(-NX*K*cos(teta(i + 1))*sin(X*K*cos(teta(i + 1)))
        *sin(Y*K*sin(teta(i + 1))) + NY*K*sin(teta(i + 1))
        *cos(X*K*cos(teta(i + 1)))*cos(Y*K*sin(teta(i + 1))));
    }
}
}

//calcula norma usando integral sobre a fronteira e mesma aprox.
da integral de linha usada em F e DF;
double Norma(func_de_onda psi){
mat A, B, C, components, NORM2;

A.set_size(num_pontos, psi.trunc_base);
B.set_size(num_pontos, psi.trunc_base);
C.set_size(psi.trunc_base, psi.trunc_base);
components.set_size(psi.trunc_base, 1);
NORM2.set_size(1, 1);

for(int l = 0; l < psi.trunc_base; l++){
components(l, 0) = psi.componentes(l);
}

for(int l = 0; l < num_pontos; l++){
    for(int m = 0; m < psi.trunc_base; m++){
        A(l, m) = npDphi(psi.k, x[l], y[l], nx[l], ny[l], m);
        B(l, m) = A(l, m)*rn[l];
```

```
    }
}

C = (1/(2*psi.k*psi.k))*(perimetro)/
((double)(num_pontos))*A.t()*B;
NORM2 = components.t()*C*components;
return ( sqrt(NORM2(0,0)) );
}

//passos do método de vergini-saraceno:
// 1 - Construir matrizes F e dF;
// 2 - Diagonalizar F;
// 3 - Selecionar os subespaços de dimensão numericamente nula
(despreza autovalores negativos)
// 4 - Truncar dF para o subespaço efetivo
// 5 - Diagonalizar dF'
// 6 - Testar  $\text{modulo}(2/\lambda) < dk$ , se sim,  $k - 2/\lambda$  é autovalor

void Vergini_Saraceno_armadillo(){
int null_sub_spaces = 0;
cx_vec eigval_efetivo_c;
    cx_mat eigvec_efetivo_c;
    mat dF_efetivo, C;
    double gama_max;
func_de_onda estado;
autovalores.set_size( numeros_onda );
    ofstream coeficientes;
    coeficientes.open("wf_coef.txt");
    int loop = 0;

while(n < numeros_onda){

    //while(loop < 1) {
        atualiza_N();

        //setando tamanhos das matrizes que dependem da dimensão N;
        F.set_size(N,N);
        dF.set_size(N, N);
        G.set_size(num_pontos,N);
```

```
H.set_size(num_pontos,N);
c.set_size(N);

//1 - Começo da construção de F e dF
for(int l = 0; l < num_pontos; l++){
    for(int m = 0; m < N; m++){
        G(l, m) = phi(k, x[l], y[l], m);
        if(rn[l] != 0){
            H(l, m) = G(l,m)/rn[l];
        }
        else{
            H(l,m) = 0;
        }
    }
}

F = (perimetro/((double)num_pontos))*G.t()*H;

for(int l = 0; l < num_pontos; l++){
    for(int m = 0; m < N; m++){
        if(rn[l] != 0){
            G(l, m) = phi(k, x[l], y[l], m)/rn[l];
        }
        else{
            G(l,m) = 0;
        }
        H(l, m) = rpDphi(k, x[l], y[l], m)/k;
    }
}

dF = (perimetro/(double)num_pontos)*(G.t()*H + H.t()*G);

//Final de 1

//2 - Diagonalizando F;
eig_sym(eigval, eigvec, F);
gama_max = max(eigval);

// Final de 2;
```

```
// 3 - Selecionando subespaços de dimensão numericamente nula

for (int l = 0; l < N; l ++ ){
    if(eigval(l) < evtol){//se o teste for em valor absoluto
        todo o passo 4 tem q ser refeito!!!!!!!
        null_sub_spaces++;
    }
    else{ break; }
}

//setando tamanhos das matrizes que dependem da dimensão
efetiva N - null_sub_spaces = N_ef;
dF_efetivo.set_size(N - null_sub_spaces,
N - null_sub_spaces);
eigval_efetivo.set_size(N - null_sub_spaces);
eigvec_efetivo.set_size(N - null_sub_spaces,
N - null_sub_spaces);
eigval_efetivo_c.set_size(N - null_sub_spaces);
eigvec_efetivo_c.set_size(N - null_sub_spaces,
N - null_sub_spaces);
C.set_size(N , N - null_sub_spaces);
eigval_efetivo.set_size(N - null_sub_spaces);
c_ef.set_size(N - null_sub_spaces);

// Final de 3

// 4 - Truncando dF para base de dimensão efetiva

//constroi mudança de base com elementos complexos
for(int l = 0; l < N; l++){
    for(int m = N - 1; m >= null_sub_spaces; m--){
        C(l,m - null_sub_spaces) = eigvec(l, m)/sqrt(eigval(m));
    }
}
//cout << "\t" << "calculou C" << endl;

dF_efetivo = C.t()*dF*C;
```

```
//Final 4
```

```
//5 - Diagonalizando dF'
```

```
eig_sym(eigval_efetivo, eigvec_efetivo, dF_efetivo);
```

```
for(int l = 0; l < N - null_sub_spaces; l++){
```

```
    eigval_efetivo(l) = -2/eigval_efetivo(l);
```

```
}
```

```
//Final de 5
```

```
// 6 - testando modulo(2/lambda) < dk, se sim, k -2/lambda  
é autovalor
```

```
for(int l = 0; l < N - null_sub_spaces; l++){
```

```
    if(modulo(eigval_efetivo(l)) <= dk){
```

```
        if(n < numeros_onda){
```

```
            autovalores(n) = k + eigval_efetivo(l);
```

```
            n++;
```

```
            estado.trunc_base = N;
```

```
for(int j = 0; j < N - null_sub_spaces; j++){
```

```
    c_ef(j) = eigvec_efetivo_c(j, l).real();
```

```
}
```

```
    if(plot == 1){
```

```
        c = C*c_ef;
```

```
        estado.tensao = as_scalar(c.t()*F*c);
```

```
        estado.componentes = c;
```

```
    }
```

```
estados.push_back(estado);
```

```
    }
```

```
}
```

```
}
```

```
//Fim de 6
```

```
//incrementando
```

```
        k = k + 2*dk;
        null_sub_spaces = 0;
        loop++;
    }

    autovalores = sort(autovalores);
    for(int i = 0; i < numeros_onda; i++){
    Energias.precision(16);
        Energias << autovalores(i) << endl;
        estados[i].k = autovalores(i);
        estados[i].n = i + 1;
        //cout.precision(16);
    }

}

void wf(func_de_onda psi){

    ofstream arq;
    double PHI = 0, norma;
    psi.nome = nomeia("wf");
    cout << psi.nome << endl;
    arq.open(psi.nome);
    preenche_espaco();
    cout << "calculando norma de psi" << endl;

    norma = Norma(psi);

    cout << "norma_psi : " << norma << endl;
    cout << "k_mu : " << psi.k << endl;

    for(int i = 0; i < (int)Sx.size() - 1; i++){
        for(int j = 0; j < psi.trunc_base; j++){
            PHI = PHI + psi.componentes(j)
                *phi(psi.k, Sx[i], Sy[i], j);
        }

        PHI = PHI/norma;
        arq.precision(16);
```

```
        arq << Sx[i] << "\t" << Sy[i] << "\t" << PHI*PHI <<endl;
        PHI = 0;
    }

arq.close();
}

int main(){
    int h, m, s;
    double seconds;

carrega_frenteira();

    Energias.open(nomeia("ks"));
    cout << nomeia("ks") << endl;

    clock_t startTime = clock();
    cout << "Rodando metodo de Vergini_Saraceno..." << endl;
Vergini_Saraceno_armadillo();
    cout << "Final da rotina do metodo..." << endl;

    seconds = double( clock() - startTime ) / (double)CLOCKS_PER_SEC;
    h = ((int)seconds/3600);
    m = ((int)seconds%3600/60);
    s = (((int)seconds%3600)%60);

    cout << "Tempo gasto na rotina = " << h << "h" << m << "m"
        << s << "s" << endl;

    if(plot == 1){
        cout << "Plontando estado " << funcao_onda_i << endl;
        wf(estados[funcao_onda_i - 1]);
    }

    cout << "Final da rotina." << endl;

Energias.close();
```

```
    return 0;  
}
```

.2 Curriculum Vitae

Nome: Kainã Terto Pereira

Nascido em 19 de Novembro de 1990 em Maués - AM, cursou Bacharelado em Física (2008-2012) na UFPE e mestrado também no Departamento de Física da UFPE (2016-2018).

Publicações:

TERTO, K. et al. Continuous variables quantum computation over the vibrational modes of a single trapped ion. *Optics Communications*, [S.l.], v.397, p.166–174, 2017. ([TERTO et al., 2017](#))

LIMA, T. A.; TERTO, K.; AGUIAR, F. M. de. $1/f^\alpha$ noise in spectral fluctuations of nonchaotic quantum billiards. *Manuscrito em Preparação*, [S.l.], 2018. ([LIMA; TERTO; AGUIAR, 2018](#))